

For Reference

NOT TO BE TAKEN FROM THIS ROOM

For Reference

NOT TO BE TAKEN FROM THIS ROOM

Ex libris
UNIVERSITATIS
ALBERTAENSIS





Digitized by the Internet Archive
in 2019 with funding from
University of Alberta Libraries

<https://archive.org/details/Benesch1967>

SCATTERING FACTORS FOR MANY-ELECTRON ATOMIC SYSTEMS

by

ROBERT BENESCH

A THESIS

SUBMITTED TO THE FACULTY OF GRADUATE STUDIES
IN PARTIAL FULFILMENT OF THE REQUIREMENTS FOR THE DEGREE
OF MASTER OF SCIENCE

DEPARTMENT OF CHEMISTRY

UNIVERSITY OF ALBERTA

EDMONTON, ALBERTA

APRIL, 1967

UNIVERSITY OF ALBERTA
FACULTY OF GRADUATE STUDIES

The undersigned certify that they have read and recommend to the Faculty of Graduate Studies for acceptance, a thesis entitled "SCATTERING FACTORS FOR MANY-ELECTRON ATOMIC SYSTEMS", submitted by ROBERT BENESCH in partial fulfilment of the requirements for the degree of Master of Science.

ABSTRACT

The coherent and incoherent scattering factors and intensities for x-rays and electrons have been calculated for the neutral atoms He to Kr from the analytical S.C.F. functions of Clementi. Results for x-rays are also presented for a number of positive and negative ions of chemical interest. The coherent scattering factors can be used to assess the goodness of these functions for evaluating one-electron properties.

ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to thank Dr. G. L. Malli for the encouragement and interest he has shown throughout the course of this work.

This project has also benefited from fruitful discussions with Dr. S. Fraga, to whom the author is especially thankful for the loan of input cards necessary to the computations, and for his criticism of the manuscript. Thanks are also due to Dr. C. Valdemora for helpful suggestions and discussions.

It is a pleasure to thank the staff of the Computing Centre, University of Alberta, for the use of the I.B.M. 1401/7040 system on which the calculations were performed.

Financial support from the National Research Council and the University of Alberta is gratefully acknowledged.

TABLE OF CONTENTS

	Page
ABSTRACT	(i)
ACKNOWLEDGEMENTS	(ii)
LIST OF FIGURES	(v)
LIST OF TABLES	(v)
 I. INTRODUCTION	
General	1
Definition of Terms	2
A Classical Approach to the Determination of Coherent Scattering Factors	5
Theory of X-Ray and Electron Scattering	7
 II. THEORETICAL	
The Formalism for Spherically Symmetric Charge Distributions	15
Methods for Treating Non-Spherical Charge Distributions	20
Averaging Procedure for Aspherical Charge Distributions	22
Evaluation of the Radial Integrals	26
Sample Formulae for Krypton	28
Notation for the Scattering Factors	30
A Sample Calculation	31
Scattering Factors for Electrons	33

III. DISCUSSION

General	35
Distribution Functions from Scattering Data	36
Determination of Electronic Energies from Scattering Data	40
Validity of Results	42
 BIBLIOGRAPHY	 53
EXPLANATION OF APPENDICES	56

LIST OF FIGURES

	Page
1. Figure 1 - Illustration of the scattering vectors and the scattering plane	3
2. Figure 2	5

LIST OF TABLES

1) Table 1 - Table of coefficients for the radial matrix elements	19
2) Table 2 - Ratio of total to coherent scattered x-ray intensities	47
3) Table 3 - Incoherent scattering factors for helium	50

I. Introduction

The inherent property of well-ordered systems like crystals to produce diffraction patterns when bombarded with x-ray radiation or electron beams has provided a very useful method for the determination of chemical structures. In recent years x-ray analysis has been employed with increasing success in the structural elucidation of complex molecules and macromolecules; an outstanding example of the latter case being the total structural determination of vitamin B₁₂ by D. Hodgkin and co-workers [22]. The scattering of x-rays has also proved useful in the study of order-disorder phenomena and lattice vibrations in crystals.

Since any experiment involving the scattering of electrons or x-rays necessarily requires the measurement of intensities, a knowledge of the appropriate form factors (German: atomformfaktor) is necessary. These factors, more commonly known as the scattering factors, can be determined if the electron distribution of the system is known.

Two methods used for describing the electronic distributions of atoms or ions are the Thomas-Fermi-Dirac and Hartree-Fock methods. The former is of a statistical nature and has been used to best advantage for describing heavy atoms. Corresponding analytical expressions and values of the scattering factors for electrons and x-rays have been given by Bonham and Strand [5].

The Hartree-Fock or self-consistent field method has also been used to evaluate these quantities, but until recently only numerical

functions of this type were available. Calculations of the scattering factors using these functions involved a tremendous amount of work.

In 1960 analytic SCF functions for helium-like systems were computed by Roothaan et al [41] and the corresponding coherent form factors for x-rays were evaluated by Womack, Silverman and Matsen [50]. Rustgi and Tiwari [43] have also computed the coherent x-ray scattering factors and nuclear magnetic shielding constants for two, three, and four-electron systems from the functions of Roothaan.

Recently, extensive tables of analytic SCF functions have been compiled by Clementi [8] for all the neutral atoms He to Kr and for a large number of positive and negative ions. These functions offer an excellent opportunity to compute a number of one-electron properties like nuclear magnetic shielding constants, quadrupole coupling constants, octopole moments and so forth. These quantities, in addition to others, have been calculated for a large number of atomic systems from Clementi's functions [33, 34, 35].

It is the purpose of this thesis to give the necessary formalism for evaluating the coherent and incoherent scattering factors and intensities for many electron atoms or ions from analytical SCF functions. A systematic compilation of the results for x-ray and electron scattering is presented in the appendices.

Definition of Terms

The bombardment of an atom or an atomic system by x-ray

radiation will result in a scattering of the incident wave due to the interaction of the electric field of the incident wave with the electric field produced by the motion of the atomic electrons. If the direction* of the incident wave is specified by a unit vector \vec{s}_0 and the direction of the scattered wave by a unit vector \vec{s} then a scattering vector \vec{S} is customarily defined as the vector difference of these two,

$$\vec{S} = \vec{s}_0 - \vec{s} . \quad (1)$$

The scattering vector has a direction perpendicular to the plane bisecting the angle 2α between the incident and scattered vectors. This plane is known as the reflecting plane since it reflects the incident into the scattered vector, as can be readily seen from the above definition or Figure 1.

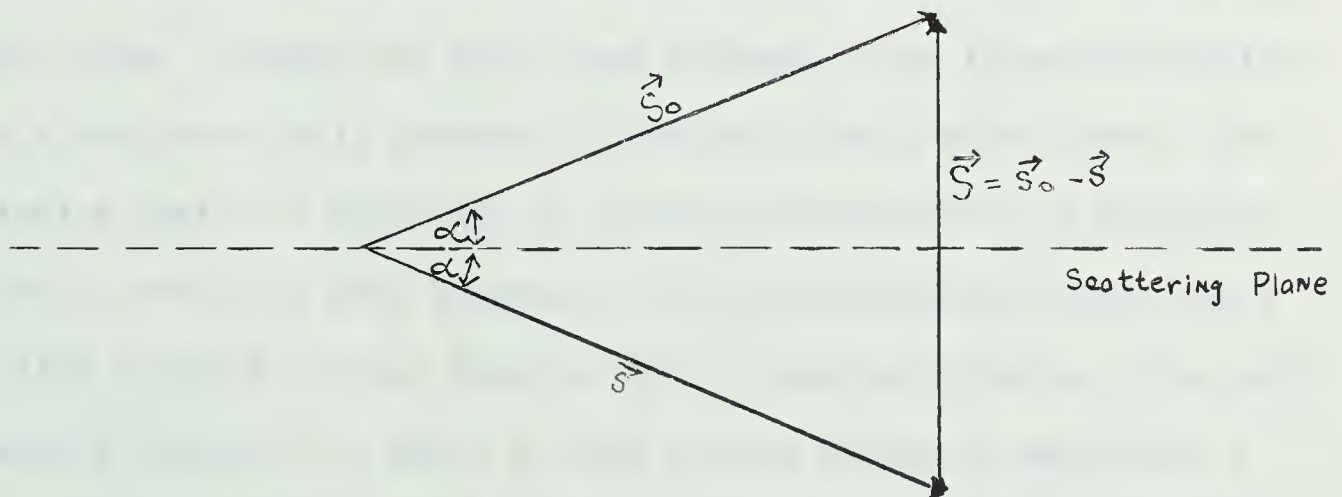


Figure 1: Illustration of the scattering vectors and scattering plane.

* For a complete treatment see, for instance, Kittel, Intoduction to Solid State Physics [30].

From the above figure and the definition of the incident and scattered vectors as unit vectors follows the relation

$$|\vec{S}| = 2 \sin \alpha \quad (2)$$

Two scattering sites [e.g., lattice points in a crystal] separated by a distance \vec{r} give rise to a phase difference [30]

$$\delta = (2\pi/\lambda)(\vec{r} \cdot \vec{S}) \quad (3)$$

between the corresponding scattered waves. For constructive interference the phase difference between interfering waves must be an integral multiple of 2π .

It is well-known that crystals produce diffraction patterns when bombarded with x rays of wavelength comparable to the distances separating constituent atoms. Since the electrons (which are responsible for the scattering) are distributed in a regular manner about the atomic nuclei, Debye* pointed out that atoms arranged in an irregular fashion, as in a gas, must still produce diffraction effects with x-rays. The scattering factor is essential to intensity measurements of scattered radiation, and is in fact a measure of the scattered amplitude from a real atom relative to that expected for a classical electron. The term "classical electron" is taken to mean a point charge of magnitude e scattering in accordance with the equation formulated by J. J. Thomson [47].

* Refer to James, The Optical Principles of the Diffraction of x-Rays, for a complete discussion [27].

A Classical Approach to the Determination of
Coherent Scattering Factors

A classical method for determining the coherent x-ray scattering factor will be considered before the general theory is discussed. An appropriate coordinate system is arranged as in Figure 2 such that the incident and reflected vectors make equal angles with the vertical axis along which the vector \vec{S} is oriented. This corresponds to Bragg reflection at an angle α from the scattering plane.

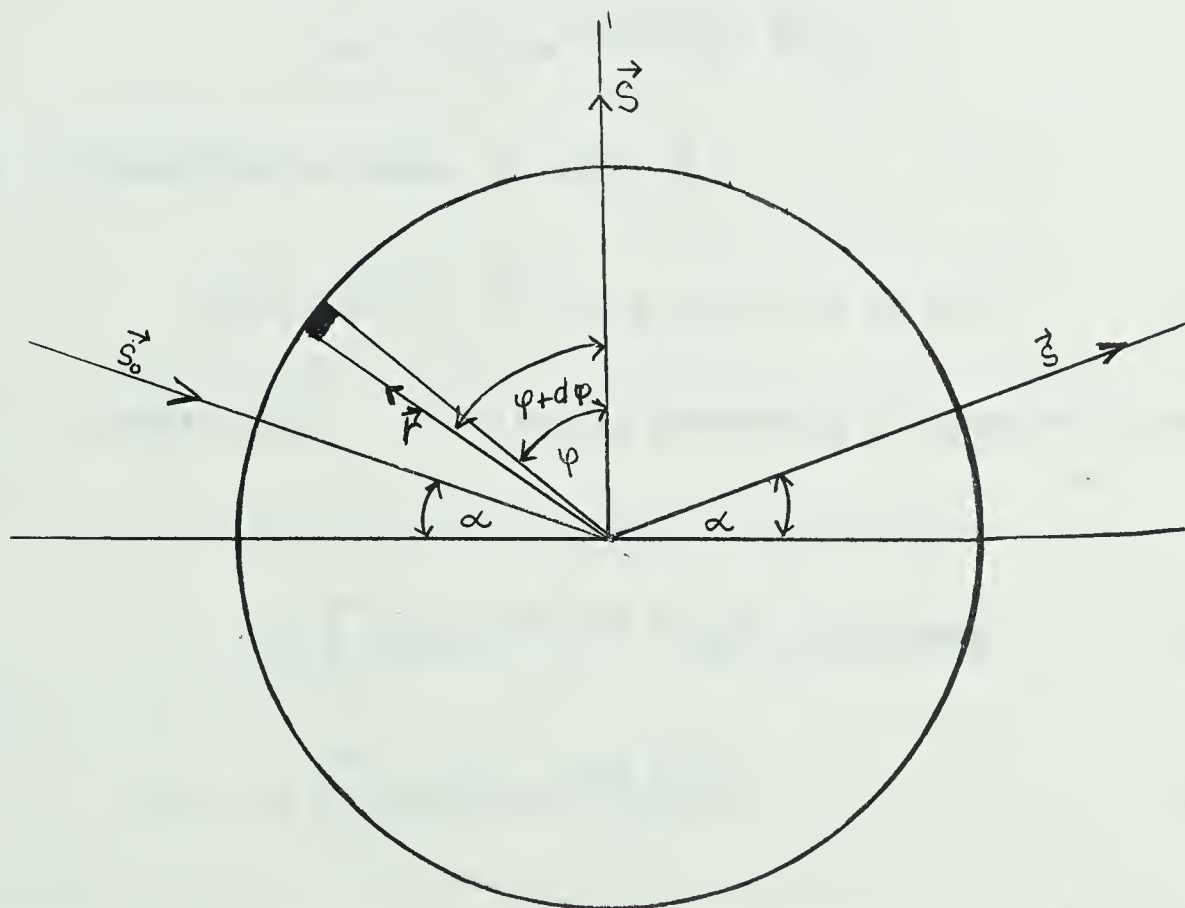


Figure 2.

The phase difference between the radiation scattered by an element of

charge located at (r, φ) and that scattered by an element of charge at the origin (this would correspond to the centre of the atom) is given, as before, by $\delta = (2\pi/\lambda)(\vec{r} \cdot \vec{S})$. The ratio of the amplitude scattered by a real one-electron atom to that scattered by a classical electron at the centre of an "atom" can be found by the method of superposition. If the charge density due to the electron can be represented by a continuous distribution function $\rho(r)$, the scattering factor is then given as

$$f = \int \rho(r) e^{i(2\pi/\lambda)(\vec{r} \cdot \vec{S})} d\tau .$$

Since \vec{r} describes an angle φ with \vec{S} ,

$$(2\pi/\lambda)(\vec{S} \cdot \vec{r}) = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \alpha r \cos \varphi = \mu r \cos \varphi \quad (4)$$

with $\mu = 4\pi(\sin \alpha)/\lambda$. If $\rho(r)$ is assumed to be spherically symmetric, then

$$f = \int \rho(r) e^{i\mu r \cos \varphi} 2\pi r^2 \sin \varphi dr d\varphi \quad (5)$$

$$= \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin \mu r}{\mu r} dr \quad (6)$$

Equation [6] is further simplified by writing $U(r)dr = 4\pi r^2 \rho(r)dr$ as the probability that the electron lies in a spherical shell described by radii r and $r + dr$, or

$$f = \int_0^\infty U(r) \frac{\sin \mu r}{\mu r} dr \quad (7)$$

for the coherent scattering factor. This factor is defined as the ratio of the radiation amplitude scattered by the charge distribution in an atomic system to that scattered by a point electron.

Equation (7) is that usually found for the coherent scattering factor in textbooks on x-ray crystallography. Taking the limit as μ approaches zero and applying L'Hospital's rule to the integrand of Equation (7) gives the familiar result

$$\begin{aligned}\lim_{\mu \rightarrow 0} f &= \int_0^{\infty} \lim_{\mu r \rightarrow 0} U(r) \frac{\sin \mu r}{\mu r} dr \\ &= \int_0^{\infty} U(r) dr = N\end{aligned}\tag{8}$$

where N is the total number of electrons.

Theory of x-Ray and Electron Scattering

The method described above for determining the scattering factor is straightforward once the electron distribution is known. The picture it presents is misleading, since the total intensity of scattered radiation at moderate scattering angle is composed of two parts, coherent and incoherent. The coherent scattering is associated with processes in which the scattering system remains in the same energy state, thereby implying that the scattered and incident radiation are of equal frequency. The incoherent scattering involves transitions from one energy state to another as a result of the perturbation, thereby causing the scattered radiation to be of a longer wavelength. Because of this

wavelength shift, the incoherent scattering is often referred to as inelastic or Compton scattering. The intensities of both types of scattering can provide useful information on electron distributions; a topic which will be referred to the discussion section.

The total intensity of x-rays or electrons scattered from an atom in an initial state described by ψ_m is given* by

$$I(\gamma) = \sum_n p_n \langle \psi_m | P_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | P_n^* | \psi_m \rangle \quad (9)$$

with the summation running over all those states ψ_n for which the excitation energy or energy difference $(E_n - E_m)$ is less than the energy of the incident beam. The scattering angle is given by γ .

For electron scattering within the framework of the first Born approximation [39], the parameters p_n are defined by the ratio k_n/k , where k_n and k are the amplitudes of the wave vectors for the scattered and incident particles. The amplitude of the scattered wave vector is given as

$$k_n = [k^2 - (E_n - E_m)]^{1/2} \quad (10)$$

with the energy defined per unit surface. For electron scattering the operator P_n is defined as

$$P_n = \sqrt{I_{cl}} \left[-N + \sum_k \exp \{ i \vec{S}_n \cdot \vec{r}_k \} \right] \quad (11)$$

* The notation of Bonham [4] is adopted. The operator P_n^* is the complex conjugate of P_n .

with the summation running over all the electrons of the system. The vector \vec{r}_k is defined as the position vector for the k 'th electron with \vec{S}_n representing the vector difference between the incident and scattered vectors. It is the scattering vector similar to that previously mentioned for coherent x-ray scattering, but with amplitude

$$|\vec{S}_n| = \{2k^2 - (E_n - E_m) - 2k[k^2 - (E_n - E_m)]^{\frac{1}{2}} \cos \gamma\}^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

The classical intensity I_{cl} for electrons is given by the Rutherford [44] scattering law.

In a non-relativistic formulation, the parameters p_n for x-ray scattering are defined* as $(\nu_n/\nu)^3$, where

$$\nu_n = \nu - (E_n - E_m)/h \quad (13)$$

with ν being the frequency of the incident wave.

The corresponding operator P_n for x-ray scattering is defined as

$$P_n = \sqrt{I_{cl}} \sum_j \exp\{i(\kappa \vec{S} - [(E_n - E_m)/h\nu] \vec{k}_s) \cdot \vec{r}_j\} \quad (14)$$

with the summation again extending over all electrons of the system.

The wave number of an incident wave (or propagation constant, as preferred by some authors) with wavelength λ is represented by $\kappa = 2\pi/\lambda$.

The vector \vec{S} represents the vector difference between the unit vectors in the incident and scattered direction. The vector \vec{k}_s in the scattered

* These are the Breit-Dirac recoil factors. For further information, refer to Breit [6].

direction has a magnitude which can be determined from the conservation of energy. The modulus of the scattering vector \vec{S} is equal to $2 \sin \frac{\gamma}{2}$, where the scattering angle γ is again twice the Bragg angle α . The classical intensity $I_{c\ell}$ for x-ray scattering is given by the Thomson scattering equation [47].

Since the coherent scattering only involves the ground state of the system, Equation (9) reduces to

$$I_c(\gamma) = \langle \psi_m | P | \psi_m \rangle \langle \psi_m | P^* | \psi_m \rangle = |\langle \psi_m | P | \psi_m \rangle|^2 \quad (15)$$

for the coherent intensity. The operator P is defined by Equations (11) and (14) respectively, with $E_n - E_m = 0$. By difference, the incoherent scattered intensity is given by

$$I_i(\gamma) = I(\gamma) - I_c(\gamma) \quad (16)$$

The determination of the incoherent scattered intensity for electrons or x-rays usually involves certain approximations in order that the closure relation may be used when summing the contributions from excited states. However, Bonham [4] has developed a rigorous treatment for using the closure relation via a time-dependent formalism originally suggested by Lamb [32] and Zemach and Glauber [51,52]. The zero-order contribution given by Bonham can be written as

$$I(\gamma) = \langle \psi_m | PP^* | \psi_m \rangle = \langle \psi_m | |P|^2 | \psi_m \rangle \quad (17)$$

where the operator P has the same definition as that used in Equation (15). Equation (17) depends only on the ground state of the system.

It represents the usual Waller-Hartree equation for the total x-ray scattering or the Morse expression for total electron scattering.

From Equations (15, 16, 17) the incoherent contribution to the total intensity is

$$I_i(\gamma) = \langle \psi_m | |P|^2 | \psi_m \rangle - |\langle \psi_m | P | \psi_m \rangle|^2 . \quad (18)$$

The remaining discussion will be centered on Equations (15) and (18).

The notation conventionally employed for the above equations is

$$I(\gamma)/I_{cl} = F^2(\gamma) + S(\gamma) , \quad (19a)$$

$$I_c(\gamma)/I_{cl} = F^2(\gamma) , \quad (19b)$$

$$I_i(\gamma)/I_{cl} = S(\gamma) , \quad (19c)$$

where $F(\gamma)$ and $S(\gamma)$ are known as the coherent and incoherent scattering factors. They are defined from the general equations above as

$$F(\gamma) = \langle \psi_m | \sum_j \exp\{i\vec{s} \cdot \vec{r}_j\} | \psi_m \rangle , \quad (20)$$

$$S(\gamma) = \langle \psi_m | \sum_j \exp\{i\vec{s} \cdot \vec{r}_j\} |^2 | \psi_m \rangle - F^2(\gamma) . \quad (21)$$

The theory of x-ray scattering has been treated by Waller and

Hartree [48], Klein [31], and Wentzel [49]. A particularly useful equation has been derived by Waller and Hartree [48], who approximated the total function ψ_m , by a single Slater determinant. They obtained

$$I/I_{cl} = \langle \psi_m | | \sum_n \exp\{i\kappa \vec{S} \cdot \vec{r}_n\}|^2 | \psi_m \rangle \quad (22)$$

$$= N + \sum_j \sum_{k \neq j} (f_{jj} f_{kk}^* - |f_{jk}|^2), \quad (22a)$$

with

$$f_{jk} = \left\{ \int \varphi_j^*(n) \exp\{i\kappa \vec{S} \cdot \vec{r}_n\} \varphi_k(n) d\tau(n) \right\} \delta(\eta_j, \eta_k), \quad (22b)$$

where N denotes the number of electrons in the atom or ion. The summation in n extends over the electrons while the summations in j and k run over the corresponding spin-orbitals. The spin functions are represented by η_j and η_k .

Equation (22) can be recast in the form

$$I/I_{cl} = N + \left[\sum_j f_{jj} \right]^2 - \sum_j |f_{jj}|^2 - \sum_j \sum_{k \neq j} |f_{jk}|^2 \quad (23)$$

since

$$\left[\sum_j f_{jj} \right]^2 = \sum_j |f_{jj}|^2 + \sum_j \sum_{k \neq j} f_{jj} f_{kk}^*.$$

The coherent scattered intensity is given as

$$\begin{aligned}
 I_c/I_{cl} &= |\langle \psi_m | \sum_n \exp\{i\kappa \vec{S} \cdot \vec{r}_n\} | \psi_m \rangle|^2 \\
 &= \left| \sum_j f_{jj} \right|^2 .
 \end{aligned} \tag{24}$$

Subtracting this quantity in Equation (23) gives the Waller-Hartree expression

$$\begin{aligned}
 I_i/I_{cl} &= N - \sum_j |f_{jj}|^2 - \sum_j \sum_{k \neq j} |f_{jk}|^2 \\
 &= N - \sum
 \end{aligned} \tag{25}$$

for the incoherent scattered intensity. Note that Equation (25) is the expression for $S(\gamma)$.

The intensity of x-ray radiation incoherently scattered increases from zero with increasing scattering angle, and approaches the number of electrons N in the atomic system. On the other hand, the coherent scattering factor (the square root of the intensity) decreases from its maximum value of N at zero scattering angle and approaches zero with increasing angle. The sum of the two intensities in an arbitrary direction is always constant for any value of the scattering variable, as shown by Wentzel [49].

The scattering for electrons is amenable to a treatment similar to that given for x-rays. In fact, the electron scattering factors can be defined in terms of the corresponding factors for x-rays, and for this reason the necessary equations will be given in the next section.

II. Theoretical

The Formalism for Spherically Symmetric Charge Distributions

The evaluation of the scattering factors, and indeed the formalism used in any such evaluation, is dependent upon the model^{*} employed in describing the electronic distribution about the atom. In the present treatment recently calculated [8] analytical self-consistent field functions were used.

The scattering vector for a spherically symmetric atom may be taken parallel to the polar axis (axis of z-component of angular momentum) as the scattering from such a system is independent of atomic orientation relative to the plane of scattering. With the assumption of spherical symmetry, the operator involved in the calculation of the expectation values may be expanded by using the well-known plane wave expansion

$$\exp\{i\mu r \cos \theta\} = \sum_p i^p [4\pi(2p+1)] Y_p^0(\theta) j_p(\mu r) \quad (26)$$

for an electromagnetic wave travelling with its electric vector parallel to the z-axis. In the above formula, the $j_p(\mu r)$ are the spherical Bessel functions, expressible in terms of the ordinary Bessel functions of the first kind of order half an odd integer. The polar angle is designated by θ while μ represents the quantity $4\pi(\sin \alpha)/\lambda$.

* Compare the formalism and results given by Bonham and Strand [5], who employed the Thomas-Fermi-Dirac statistical model in their evaluation of the scattering factors.

If the one electron state functions are expanded in terms of orthonormal basis functions of appropriate* symmetry,

$$\varphi_i = \sum_t \chi_t C_{ti} \quad (27)$$

then a detailed expression for the f_{jk} terms can be developed. The following development is restricted to the case when the basis functions are Slater-type orbitals

$$\chi_t = N_t R_t(r) Y_{\ell_t}^{m_t}(\theta, \varphi), \quad (28a)$$

with

$$R_t(r) = r^{n_t - 1} e^{-\xi_t r} \quad (28b)$$

where N_t is the radial normalization factor, ξ_t the orbital exponent and n_t the principal quantum number. The functions $Y_{\ell_t}^{m_t}(\theta, \varphi)$ are the normalized spherical harmonics, with ℓ_t and m_t being the quantum numbers which define the symmetry. That is, they are the azimuthal and magnetic quantum numbers, respectively.

From Equations (26, 27, 28a, 28b) it is readily seen that the f_{jk} terms can be written in the form

$$f_{jk} = \sum_p \sum_t \sum_v i^p [4\pi(2p+1)]^{\frac{1}{2}} N_t N_v C_{tj} C_{vj} \times$$

* For convenience and simplicity in the writing of equations, the symmetry designation will be omitted.

$$\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 R_t(r) R_v(r) j_p(ur) Y_p^0(\theta) Y_{\ell_t}^{m_t^*}(\theta, \varphi) \times \\ Y_{\ell_v}^{m_v}(\theta, \varphi) d\varphi \sin \theta d\theta dr, \quad (29)$$

where the summation over t corresponds to φ_j while that over v corresponds to φ_k . The above equation can be simplified by writing for the spherical harmonics the identity

$$Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta(\ell, m) e^{im\varphi} \quad (30)$$

where the $\Theta(\ell, m)$ are the associated Legendre functions as defined by Condon and Shortley. Integration over the azimuthal angle gives

$$f_{jk} = \frac{1}{2\pi} \sum_p \sum_t \sum_v i^p (2p+1) \cdot \left\{ \frac{2}{2p+1} \right\}^{\frac{1}{2}} N_t N_v C_{tj} C_{vk} \cdot \langle jptv \rangle \cdot \\ \delta(m_t, m_v) \cdot 2\pi \int_0^\pi \Theta(p, 0) \Theta(\ell_v, m_t) \Theta(\ell_v, m_v) \sin \theta d\theta, \quad (31)$$

with

$$\langle jptv \rangle = \int_0^\infty r^2 R_t(r) R_v(r) j_p(\mu r) dr. \quad (32)$$

In the writing of Equation (31) the relationship

$$Y_p^0(\theta) = \left(\frac{2p+1}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2}{2p+1} \right)^{\frac{1}{2}} \Theta(p, 0) \quad (33)$$

was employed in order that the notation of the above mentioned authors

for integrals over three associated Legendre functions, viz.

$$C^P(\ell_1 m_1; \ell_2 m_2) = \left(\frac{2}{2p+1}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\pi \Theta(p, m_1 - m_2) \Theta(\ell_1, m_1) \Theta(\ell_2, m_2) \sin \theta d\theta \quad (34)$$

could then be used to express Equation (31) in the form

$$f_{jk} = \sum_p \sum_t \sum_v i^P (2p+1) N_t N_v C_{tj} C_{vk} C^P(\ell_t m; \ell_v m) \langle jptv \rangle, \quad (35)$$

where m denotes the value common to m_t and m_v .

From the orthogonality restriction satisfied by the eigenfunctions involving the azimuthal angle ϕ follows the selection rule that for a spherically symmetric electron distribution there is no scattering from orbitals with different z -components of orbital angular momentum.

Due to the coupling of angular momenta the summation over p in Equation (35) is restricted to those values (in steps of two) for which the familiar triangular inequality

$$|\ell_t - \ell_v| \leq p \leq |\ell_t + \ell_v| \quad (36)$$

is satisfied. The coefficients of the radial integrals $\langle j \rangle$ arising from the integration over θ in Equation (36) are listed in Table 1 for Slater functions of s -, p -, d - and f -type symmetry. A similar table has been given by A. J. Freeman [14], but it excludes the coefficients arising from orbitals of f -type symmetry, which are presented here for completeness.

Table 1. Coefficients of $\langle j p q t \rangle$ in the matrix elements f_{jk} for s, p, d, and f orbitals.

q	t	Common	Coefficient of						
		Coefficient	$\langle j_0 \rangle$	$\langle j_1 \rangle$	$\langle j_2 \rangle$	$\langle j_3 \rangle$	$\langle j_4 \rangle$	$\langle j_5 \rangle$	$\langle j_6 \rangle$
s	s	1	1						
s	p ₀	$i\sqrt{3}$		1					
s	d ₀	$\sqrt{5}$			-1				
s	f ₀	$i\sqrt{7}$				-1			
p ₀	p ₀	1	1		-2				
p ₀	d ₀	$3i\sqrt{15}$		2		-3			
p ₀	f ₀	$\sqrt{3/7}$		-3		4			
d ₀	d ₀	1	1		-10/7		18/7		
d ₀	f ₀	$i/3\sqrt{35}$		27		-28		50	
f ₀	f ₀	1/33	33		-44		54		-100
p ₊₁	p ₊₁	1	1		1				
p ₊₁	d ₊₁	$3i\sqrt{5}$		1		1			
p ₊₁	f ₊₁	$3\sqrt{2/7}$			-1		-1		
d ₊₁	d ₊₁	1	1		-5/7		-12/7		
d ₊₁	f ₊₁	$i\sqrt{2/3}\sqrt{35}$		18		-7		-25	
f ₊₁	f ₊₁	1	1		-1		3/11		25/11
d ₊₂	d ₊₂	1	1		10/7		3/7		
d ₊₂	f ₊₂	$i/3\sqrt{7}$		9		14		5	
f ₊₂	f ₊₂	1	1		0		-21/11		-10/11
f ₊₃	f ₊₃	1	1		5/3		9/11		5/33

Methods for Treating Non-Spherical Charge Distributions

If the electron distribution is no longer spherically symmetric (e.g. open shells of electrons of p- or d-type symmetry), the scattering will be dependent upon the orientation of the scattering vector. Equation (35) is no longer strictly valid, as the f_{jk} terms should be evaluated for an arbitrary orientation of \vec{S} .

Methods for handling this problem are discussed in the literature. McWeeny [37] has demonstrated that the scattering from an orbital of p-type symmetry oriented in an arbitrary direction can be completely described by two factors f_{\parallel} and f_{\perp} , and an angle β between the orbital axis and the vector \vec{S} . In this notation f_{\perp} represents the scattering factor for an orbital of p-type symmetry with axis oriented perpendicular to \vec{S} , while f_{\parallel} refers to the scattering factor when \vec{S} is parallel to the orbital axis. Due to geometric considerations, this method is not easily generalized to orbitals of higher angular momentum. Furthermore, if an average is carried out over all orientations of \vec{S} , e.g., an integration over the angle β weighted by an element of solid angle, $2\pi \sin \beta d\beta$, the result is equivalent to that expected on the assumption of spherical symmetry. In other words, the scattering from an open shell of p-electrons is proportional to that expected from an equivalent closed shell of p-electrons, the constant of proportionality being the ratio of the occupation numbers.

More recently, Freeman [14] has considered the evaluation of the scattering factors for open shells of p- and d-type symmetry by

group theoretical methods. An orbital with its axis oriented in an arbitrary direction can be brought parallel to the z-axis by a coordinate transformation of the basis functions. The transformation involved is a rotation, \mathcal{R} through the three Euler angles. As the radial parts of the basis functions are invariant under the group of three-dimensional rotations, only the rotation of the spherical harmonics themselves must be considered, a task complicated by the fact that the addition theorem for spherical harmonics is no longer satisfied. The results derived by Freeman for p-type orbitals are analagous to those given by McWeeny; in addition, Freeman lists formulae for matrix elements involving orbitals of d-type symmetry.

Freeman's method clearly exhibits the angular dependence of the matrix elements f_{jk} on the orientation of the scattering vector, but it has the disadvantage in that the orbitals in the rotated system are no longer eigenfunctions of the orbital angular momentum operators. This follows from the fact that the unitary rotation operator R does not commute with these operators. Hence they cannot share a set of eigenfunctions with R .

The consequence of this non-commutation can be demonstrated in the following manner*. If G is a unitary operator corresponding to the transformation \mathcal{G} and $|>$ is an arbitrary ket from the domain of G , then

$$\mathcal{G} [|>] \equiv G |>, \quad G^\dagger G = G G^\dagger = 1; \quad (37)$$

* See, for instance, Messiah, Quantum Mechanics, Vol. 2, page 1089.

and if O is an observable of a quantum system then in the transformed system

$$\mathcal{G}[O] = GOG^{-1} \quad (38)$$

Consequently, if $\vec{L} \equiv (\vec{L}_x, \vec{L}_y, \vec{L}_z)$ is a vector operator attached to the system, $L_i \equiv \vec{L} \cdot \vec{e}_i$, with \vec{e}_i a basis vector, then

$$\mathcal{G}[L_i] \equiv GB_iG^{-1} = (\vec{L} \cdot \vec{A}_i) = \tilde{G}_{ij}B_j \quad (39)$$

where \tilde{G}_{ij} represents the matrix element. By designating \vec{L} as the momentum operator and \mathcal{G} as the rotation in the above discussion, it follows that the projections of the orbital angular momentum in the rotated system are modified by the matrix elements of the rotation matrix.

Averaging Procedure for Aspherical Charge Distributions

The method to be described here for the evaluation of the scattering factors for non-spherical charge distributions does not exhibit any angular dependence since an averaging procedure originally outlined by Pohler and Hanson [40] is used. Instead of employing the plane wave expansion for a wave travelling along the positive z-axis, consider the expansion*

$$\exp\{i\mu r \cos \theta\} = 4\pi \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{m=-p}^{+p} i^p j_p(\mu r) Y_p^m(\theta, \varphi) Y_p^{*m}(\theta', \varphi') \quad (40)$$

* A. R. Edmonds Angular Momentum in Quantum Mechanics [12].

for a wave travelling in an arbitrary direction specified by the coordinates θ' , φ' . The average incoherent scattering factor for an aspherical* electronic charge distribution is determined by integrating (averaging) the expression for the f_{jk} terms over the surface of a sphere, viz.

$$\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |f_{jk}|^2 \sin \theta' d\theta' d\varphi' = \langle |f_{jk}|^2 \rangle. \quad (41)$$

For orbitals expanded in terms of Slater-type functions, the maxtrix elements are now defined by

$$f_{jk} = 4\pi \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{m=-p}^{+p} \sum_t \sum_v i^{p_{N_t N_v} C_{tj} C_{vk}} \times \left[\int_0^\infty r^2 j_p(\mu r) R_t(r) R_v(r) dr \right. \\ \left. \times \int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_p^m(\theta, \varphi) Y_{\ell_t}^{* m_t}(\theta, \varphi) Y_{\ell_v}^{m_v}(\theta, \varphi) d\varphi \sin \theta d\theta \right] \times Y_p^m(\theta', \varphi'). \quad (42)$$

Introduction of the identities for the spherical harmonics into Equation (42) and integration over the azimuthal angle gives

$$f_{jk} = \sum_p \sum_t \sum_v i^p [4\pi(2p+1)]^{\frac{1}{2}} N_t N_v C_{tj} C_{vk} C^p(\ell_t m_t; \ell_v m_v) \\ \times \langle jptv \rangle Y_p^{* m_t - m_v}(\theta', \varphi') \quad (43)$$

for the individual matrix elements. The notation for the radial and

* In what follows, the term aspherical is taken to mean non-spherical.

angular integrals is the same as that employed before. Multiplication of Equation (43) by its complex conjugate and integration over all angles θ' , φ' , making use of the orthonormality conditions satisfied by the spherical harmonics, leads to the expression

$$\begin{aligned} \langle |f_{jk}|^2 \rangle &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |f_{jk}|^2 \sin \theta' d\theta' d\varphi' \\ &= \sum_p \sum_t \sum_v (2p+1) N_t^2 N_v^2 C_{tj}^2 C_{vk}^2 C^P(\ell_t m_t; \ell_v m_v)^2 \langle jptv \rangle^2 \end{aligned} \quad (44)$$

for the average of the square of the individual matrix elements. The summation over the index p is again restricted to those values which satisfy the triangular relationship. Inspection of Equations (44) and (35) indicates an important difference concerning the parameters $C^P(\ell_j m_j; \ell_k m_k)$. In Equation (35) only those terms remain for which $m_t = m_v$; a selection rule which no longer holds in Equation (44).

The interpretation can be given in the following manner. By using the plane wave expansion and integrating over all orientations of \vec{S} , the region of space over which the orbital was originally defined has been generalized to a sphere. Since this has the physical effect of "smearing" the corresponding electron distribution throughout a spherical volume, the averaging procedure is equivalent to an assumption of spherical symmetry.

The averaging method should give the same results as the one derived on the assumption of spherical symmetry. The obvious way to

check the equivalence of the two methods would be to determine the coefficients of the radial integrals for an arbitrary f_{jk} term. This is readily accomplished by using the selection rule and the square of the absolute value of the appropriate coefficients listed in Table 1 and comparing the results obtained to those found by using the numerical values for the $C^P(\ell_j m_j; \ell_k m_k)$ of Equation (44) weighted by the values of $(2p + 1)$. Naturally, the values found by both methods is dependent upon the occupation number of the shell.

In connection with the scattering from open shells, only those terms which contribute to the incoherent scattering, i.e., the f_{jk} , have been considered. If an average over aspherical charge distributions or spherical symmetry is assumed, the terms contributing to the coherent scattering, the f_{ii} , will contain radial integrals involving only the zero-order Bessel function regardless of the symmetry or occupation number of the shell. The coefficients of higher order terms always cancel, as can be easily verified from the coefficients listed in Table 1. To illustrate this point, consider the contribution to the coherent scattering from a d-shell containing n electrons, $n \leq 10$.

Since an average over an aspherical electron distribution or a spherical distribution has been assumed, the scattering from this shell will be directly proportional to that expected from a closed d-shell,

$$\begin{aligned} \bar{f}_d &= \frac{n}{10} \{2f_0(d) + 4f_1(d) + 4f_2(d)\} \\ &= \frac{n}{10} \left\{ 2(1 \cdot \langle j_0 \rangle - \frac{10}{7} \cdot \langle j_2 \rangle + \frac{18}{7} \cdot \langle j_4 \rangle) + 4(1 \cdot \langle j_0 \rangle - \frac{5}{7} \langle j_2 \rangle - \frac{12}{7} \langle j_4 \rangle) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 4(1 \cdot \langle j_0 \rangle + \frac{10}{7} \cdot \langle j_2 \rangle + \frac{3}{7} \langle j_4 \rangle) \} \\
 & = \frac{n}{10} (10 \langle j_0 \rangle) \\
 & = n \langle j_0 \rangle \quad , \quad n \leq 10 \quad .
 \end{aligned} \tag{45}$$

It is this absence of higher order and cross terms (terms involving orbitals of different symmetry or principal quantum number) which facilitates a relatively simple evaluation of the coherent factors and intensities.

Evaluation of the Radial Integrals

The evaluation of the radial matrix elements will now be considered. The n -th order spherical Bessel function may be reduced to a polynomial in r , involving sines and cosines. By a modification of a recursion formula given by Hildebrand [21],

$$j_n(\mu r) = \frac{2n-1}{\mu r} j_{n-1}(\mu r) - j_{n-2}(\mu r) \tag{46a}$$

and the two basic relations

$$j_0(\mu r) = (\sin \mu r) / \mu r \tag{46b}$$

$$j_{-1}(\mu r) = (\cos \mu r) / \mu r \tag{46c}$$

the integral $\langle j_{pq} \rangle$ can be written as a combination of integrals of the general form

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^{\infty} R_t(r) R_v(r) \left\{ \frac{\sin \mu r}{\cos \mu r} \right\} \left(\frac{1}{\mu r} \right) r^2 dr \\
 &= \int_0^{\infty} r^{n_t + n_v} e^{-(\zeta_t + \zeta_v)r} \left\{ \frac{\sin \mu r}{\cos \mu r} \right\} \left(\frac{1}{\mu r} \right) dr \quad . \quad (47)
 \end{aligned}$$

These integrals, written in general as

$$S_n(\mu r) = \frac{1}{\mu} \int_0^{\infty} r^n e^{-\epsilon r} \sin \mu r dr \quad , \quad (48a)$$

$$C_n(\mu r) = \frac{1}{\mu} \int_0^{\infty} r^n e^{-\epsilon r} \cos \mu r dr \quad , \quad (48b)$$

can be readily evaluated by recognizing that

$$\begin{aligned}
 \mu S_n(\mu r) &= (-1)^n \int_0^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial \epsilon^n} [e^{-\epsilon r} \sin \mu r] dr \\
 &= (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \epsilon^n} \int_0^{\infty} e^{-\epsilon r} \sin \mu r dr \\
 &= (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \epsilon^n} \left[\frac{\epsilon}{\epsilon^2 + \mu^2} \right] \quad (49)
 \end{aligned}$$

and

$$C_{n+1}(\mu r) = \frac{\partial}{\partial \mu} S_n(\mu r) \quad . \quad (50)$$

Repeated differentiation of Equation (49) and collection of the terms yields the general form^{*},

* See also the work of Rustgi and Tiwari [43].

$$\mu S_n(\mu r) = \frac{\mu n!}{(\epsilon^2 + \mu^2)^{n+1}} \sum_{p=1}^{n'} (-1)^{p+1} \binom{n+1}{2p-1} \epsilon^{n-2(p-1)} \mu^{2(p-1)} \quad (51)$$

with

$$n' = \begin{cases} \frac{n+1}{2}, & \text{for } n \text{ odd} \\ \frac{n}{2} + 1, & \text{for } n \text{ even} . \end{cases}$$

Carrying out the operation indicated by Equation (50) then gives

$$G_{n+1}(\mu r) = \frac{n!}{(\epsilon^2 + \mu^2)^{n+2}} \sum_{p=1}^{n'} (-1)^{p+1} \binom{n+1}{2p-1} \mu^{2(p-1)} \epsilon^{n-2(p-1)} \quad (52)$$

$$\{A\mu^2 + B\epsilon^2\}$$

with

$$A = 2(p - n) - 3 ,$$

$$B = 2p - 1 ,$$

n' taking the values previously defined. The formal interchange of differentiation and integration in Equation (49) is justified, since the integrand is continuous and defined everywhere on the interval $(0, \infty)$.

Sample Formulae For Krypton

As an example of the application of the formulae developed thus

far, consider the evaluation of the coherent* and incoherent scattering factors for Krypton. The detailed expression for the summation terms in Equation (25) is given** by

$$\begin{aligned}
 \sum = & 2[f_{1s}^2 + f_{2s}^2 + f_{3s}^2 + f_{4s}^2] + 6[f_{2p}^2 + f_{3p}^2 + f_{4p}^2] + \\
 & 10f_{3d}^2 + 4[f_{1s,2s}^2 + f_{1s,3s}^2 + f_{1s,4s}^2 + f_{2s,3s}^2 + f_{2s,4s}^2 \\
 & + f_{3s,4s}^2] + 12[f_{1s,2p}^2 + f_{1s,3p}^2 + f_{1s,4p}^2 + f_{2s,2p}^2 + f_{2s,3p}^2 + \\
 & f_{2s,4p}^2 + f_{3s,2p}^2 + f_{3s,3p}^2 + f_{3s,4p}^2 + f_{4s,2p}^2 + f_{4s,3p}^2 + \\
 & f_{4s,4p}^2] + 20[f_{1s,3d}^2 + f_{2s,3d}^2 + f_{3s,3d}^2 + f_{4s,3d}^2] + \quad (53) \\
 & 12[f_{2p,2p}^2 + f_{3p,3p}^2 + f_{4p,4p}^2 + f_{2p(0)3p}^2 + f_{2p(0)4p}^2 + \\
 & f_{3p(0)4p}^2] + 24[f_{2p(2)3p}^2 + f_{2p(2)4p}^2 + f_{3p(2)4p}^2] + \\
 & 24[f_{2p(1)3d}^2 + f_{3p(1)3d}^2 + f_{4p(1)3d}^2] + 36[f_{2p(3)3d}^2 + \\
 & f_{3p(3)3d}^2 + f_{4p(3)3d}^2] + \frac{100}{7} f_{3d(2)3d}^2 + \frac{180}{7} f_{3d(4)3d}^2
 \end{aligned}$$

* Reference must be made to the calculations of James and Brindley [28] by an interpolation procedure. Calculations have also been carried out by Berghius et al [3], Keating and Vineyard [29], Hurst, Miller and Matsen [24], Freeman [15, 16], Silverman, Platas and Matsen [45], Hurst [23], Womack, Silverman and Matsen [50], Bonham and Strand [5], Rustgi and Tiwari [43], Cornille and Roux [11], and Polher and Hansen [40], among others.

** The writing of this and other expressions is simplified by the grouping of similar terms with the common factor explicitly written. The notation for the scattering factors is defined below. Subindices denote orbitals.

The number of terms contributing to the incoherent scattering factor for a system with s-, p-, and d-type electrons is

$$\frac{1}{2} n(n+1) + \frac{1}{2} n_p(n_p+1) + n_p n_d + 2n_d \quad (54)$$

where n is the total number of occupied orbitals and n_p and n_d are the number of occupied orbitals of p- and d-type symmetry, respectively. The coherent scattering factor is given by Equation (24), as

$$F = 2[f_{1s} + f_{2s} + f_{3s} + f_{4s}] + 6[f_{2p} + f_{3p} + f_{4p}] + 10f_{3d} \quad (55)$$

Notation for the Scattering Factors

The notation employed in Equations (53) and (55) is that originally used by Keating and Vineyard [23], extended later by Freeman [14], with

$$f_{ns} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tns} C_{vns} \int R_t(r) R_v(r) j_0(\mu r) r^2 dr ,$$

$$f_{ns, n's} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tns} C_{vn's} \int R_t(r) R_v(r) j_0(\mu r) r^2 dr ,$$

$$f_{np} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tnp} C_{vnp} \int R_t(r) R_v(r) j_0(\mu r) r^2 dr ,$$

$$f_{np, np} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tnp} C_{vnp} \int R_t(r) R_v(r) j_2(\mu r) r^2 dr ,$$

$$f_{np(m)n'p} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tnp} C_{vn'p} \int R_t(r) R'_v(r) j_m(\mu r) r^2 dr, \quad m = 0, 2$$

$$f_{ns,n'p} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tns} C_{vn'p} \int R_t(r) R'_v(r) j_1(\mu r) r^2 dr,$$

$$f_{np(m)n'd} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tnp} C_{vn'd} \int R_t(r) R'_v(r) j_m(\mu r) r^2 dr, \quad m = 1, 3$$

$$f_{nd} = \sum_t \sum_v N_t N_v C_{tnd} C_{vnd} \int R_t(r) R'_v(r) j_0(\mu r) r^2 dr$$

$$f_{nd(m)n'd} = \sum_t \sum_v C_{tnd} C_{vn'd} \int R_t(r) R'_v(r) j_m(\mu r) r^2 dr, \quad m = 0, 2, 4. \quad (56)$$

The summations in the above expressions extend over the corresponding basis functions. The order of the spherical Bessel functions defines the individual factors in an unambiguous fashion.

A Sample Calculation

In order to illustrate the evaluation of one of the above terms, consider

$$\begin{aligned} f_{3d(4)3d} &= \sum_t \sum_v N_t N_v C_{t3d} C_{v3d} \int R_t(r) R'_v(r) j_4(\mu r) r^2 dr \\ &= \sum_t \sum_v N_t N_v C_{t3d} C_{v3d} \cdot \{105 \int r^n e^{-\epsilon r} (\sin \mu r) / (\mu r)^5 dr \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - 45 \int r^n e^{-\epsilon r} (\sin \mu r) / (\mu r)^3 dr + \int r^n e^{-\epsilon r} (\sin \mu r) / \mu r dr \\
 & - 105 \int r^n e^{-\epsilon r} (\cos \mu r) / (\mu r)^4 dr + 10 \int r^n e^{-\epsilon r} (\cos \mu r) / (\mu r)^2 dr \} \\
 & = 3840 \sum_t \sum_v N_t N_v C_{t3d} C_{v3d} \{ \epsilon \mu^4 / (\epsilon^2 + \mu^2)^6 \} .
 \end{aligned}
 \tag{57}$$

For this case, $n = n_t + n_v = 6$ for all t, v since the 3-d orbital for Krypton was expanded in terms of Slater orbitals of this symmetry and quantum number. The sum of the orbital exponents, $\zeta_t + \zeta_v$, has been designated by the variable ϵ .

Analytical expressions such as the one given above were incorporated in a general program and evaluated by computer. Values are presented in the appendix for (He to Kr) for the incoherent atomic scattering factors $S(\mu)$, the coherent atomic scattering factor $F(\mu)$, the coherent scattered intensity $F^2(\mu)$ and the quantity $[N - F(\mu)]^2$ for a wide range of values of the scattering variable, $\mu = 4\pi(\sin \alpha)/\lambda$, in \AA^{-1} . Besides the individual factors f_{ij} which necessarily had to be evaluated, values^{*} of the sums of the squares of the diagonal and off-diagonal elements and the ratio of the incoherent to coherent x-ray intensity have been evaluated for all the neutral atoms He to Kr and for a number of positive and negative ions of chemical interest.

* Unpublished results.

Scattering Factors For Electrons

The electron scattering has been treated in a manner similar to that described^{*} for x-rays. The operator yielding the expectation values was given as^{**}

$$Q = (-N + \sum_n \exp\{i\kappa\vec{S} \cdot \vec{r}_n\}) \quad (58)$$

with the classical intensity defined in a manner different from that for the x-ray scattering. Making use of the notation introduced above for the coherent and incoherent x-ray scattering factors, the total scattered intensity for electrons can be written as

$$\begin{aligned} I/I_{cl} &= N^2 - 2NF + F^2 + S \\ &= (N - F)^2 + S \end{aligned} \quad (59)$$

with the coherent intensity defined as $I_c/I_{cl} = (N - F)^2$. The coherent scattering factor, customarily designated as $f_e^1(\mu)$, is then the square root of this quantity except for the case when the scattering variable μ assumes the value zero. By a limiting procedure, the expression known as Ibers [25] formula

$$f_e^1(0) = \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle \quad (60)$$

can be obtained. This equation has been rederived by Strand and Bonham

* For details, reference can be made to the work of Bartel and Gavin, Jr. [1,2], and to that of Iijima, Bonham and Ando [26].

** Equation [11] of the theory section.

[46]. Table 1 of Appendix I lists the values of $f_e^{(1)}(0)$ for a series of positive ions, neutral atoms, and negative ions. These $f_e^{(1)}(0)$ values were determined from Equation (59) using the total expectation value of $\langle r^2 \rangle$ determined from the analytical Hartree-Fock functions of Clementi [8] and Malli [36]. Values for the neutral atoms only have been given by Bonham and Strand [5] and Strand and Bonham [46].

III. Discussion

The averaging procedure described above is valid for the scattering from a system of non-interacting gaseous atoms whose space axes are randomly oriented with respect to the scattering plane. The assumption of spherical symmetry does not conflict with the picture presented by authors of reference works^{*} on x-ray diffraction; wherein the x-ray is described as interacting with the time-average electron cloud of the scattering system and setting it into sympathetic motion. In the absence of any forces tending to remove the degeneracy (e.g., Zeeman or Stark effects), the time-average distribution of a degenerate open shell will be spherically symmetric.

The subject of electron and x-ray scattering is directly related to the general problem of scattering by a central potential. Equations for electron and x-ray scattering are an outgrowth of this more general case, and as such, are subject to the same approximations involved in the general problem. For instance, the summation in Equation (9) for the electron scattering involved only those excited states for which the energy of the incident beam was smaller than the energy differences, $E_n - E_m$, between the ground and excited states. This is nothing more than a manifestation of the first Born approximation, but it insures that the incident electron will not become bound. The problem of x-ray scattering involves the calculation of the amplitude of scattered radiation when an electromagnetic wave interacts with a

^{*} See, for example, James, The Optical Principles of the Diffraction of X-rays [27].

system whose unperturbed wave functions are known. To deal satisfactorily with this problem, the total radiation field and scattering system should be considered as forming a single quantized system, as proposed by Dirac.* Considerations such as these are beyond the scope of this work. Rather, some interesting applications of x-ray scattering data will be examined.

Determination of Distribution Functions From Scattering Data

Conventional x-ray crystallography, based on measurements of coherently scattered radiation, is a method used for determining chemical structures. However, the measurement of coherent scattered intensities can be applied to another problem, namely the determination of radial charge density distributions. The coherent scattering factor is given as the expectation value of a one-electron operator and can be used to describe the electron density about nuclei, a one-electron property. This is readily seen from Equation (15) which reduces to the familiar expression

$$I_c(\mu)/I_{cl} = F^2(\mu) \quad , \quad (61)$$

with

$$F(\mu) = \int_0^\infty D(r) \sin \frac{\mu r}{r} \, dr \quad (62)$$

for spherically symmetric atoms or an average over random orientations of aspherical atoms, as previously shown. Again, $D(r)$ is the radial distribution, $4\pi r^2 \rho(r)$, of planetary electrons, with $\rho(r)$ the mean

* Reference can be made to Fermi [13].

electron density function with respect to the radial distance r from the nucleus. In Equation (62) the function $D(r)$ can be regarded as as sum, $\sum_j D_i(r)$, of individual one-electron distributions.

Equation (62) very clearly indicates that the electron-nuclear radial distribution $D(r)$ is related to the coherent scattering factor (as determined from experimental intensity measurements of coherently scattered radiation) by a Fourier sine integral. Taking the indicated transform gives

$$D(r)/r = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \mu F(\mu) \sin \mu r d\mu \quad (63)$$

with $\mu = 4\pi(\sin \alpha)/\lambda$. The differentiation between the elastic and total intensity is rarely carried out experimentally, but it can be done in principle. Compton [9] has accomplished this differentiation for the larger scattering angles.

Information^{*} on the electron-electron radial distribution, a two-electron property, can be determined from the total scattered intensity. That the operator giving the total scattered intensity depends on the coordinates of two electrons is recognized by writing the Waller Hartree equation^{**}

$$I/I_{cl} = \langle \psi_m | | \sum_n \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_n\} |^2 | \psi_m \rangle \quad (64)$$

* Refer to Bartell and Gavin [1,2] for further details.

** Equation (22) of the theory section.

for the total intensity in the form

$$\begin{aligned}
 I/I_{cl} &= \langle \psi_m | \sum_j \sum_k [\exp\{i\kappa \vec{s} \cdot \vec{r}_j\}] [\exp\{i\kappa \vec{s} \cdot \vec{r}_k\}]^* | \psi_m \rangle \\
 &= \langle \psi_m | \sum_j \sum_k \exp\{i\kappa \vec{s} \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_k)\} | \psi_m \rangle \quad (65) \\
 &= \langle \psi_m | \sum_j \sum_k \exp\{i\kappa \vec{s} \cdot \vec{t}_{jk}\} | \psi_m \rangle ,
 \end{aligned}$$

with $\vec{t}_{jk} \equiv \vec{r}_j - \vec{r}_k$. Rather than taking the $3N$ spatial coordinates for the N -electron wave function ψ_m from the components of the vector set $[\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \vec{r}_k, \vec{r}_\ell, \dots, \vec{r}_N]$, the components of the set $[\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \vec{t}_{jk}, \vec{r}_\ell, \dots, \vec{r}_N]$ can be employed. The wavefunction so constructed then implies the electron-electron distribution function, $P_n(\vec{t}_{jk})$ for the j 'th and k 'th electrons. It can be defined by

$$P_n(\vec{t}_{jk}) = \int \psi_n^* \psi_n d\vec{\tau} \quad (66)$$

where the integration is to be carried out over all coordinates except those of \vec{t}_{jk} .

Physically, $P_n(\vec{t}_{jk}) d\tau_{jk}$ ($d\tau_{jk} \equiv t_{jk}^2 dt_{jk} \sin \theta_{jk} d\theta_{jk} d\phi_{jk}$) can be interpreted as a probability. It describes the probability that the distance separating electrons j and k lies between t_{jk} and $t_{jk} + dt_{jk}$ while the polar and azimuthal angles defining the orientation of the vector \vec{t}_{jk} lie between θ_{jk} and $\theta_{jk} + d\theta_{jk}$ and between

φ_{jk} and $\varphi_{jk} + d\varphi_{jk}$, respectively. The angles are reckoned from any conveniently chosen reference frame. These arguments imply that the total scattered intensity can be expressed in the form

$$I/I_{cl} = \sum_j \sum_k \int P_n(\vec{t}_{jk}) \exp\{i\kappa\vec{s} \cdot \vec{t}_{jk}\} d\tau_{jk}, \quad (67)$$

which simplifies to

$$I/I_{cl} = \sum_j \sum_k \int P_{jk}(t) \sin \frac{\mu t}{\mu t} dt \quad (67a)$$

when the atom is spherically symmetric or when an average over random orientations of \vec{s} is considered. In Equation (67a), $P_{jk}(t)$ is the radial distribution function of electron j with respect to electron k . The mean density, $\rho_{jk}(t)$ of one electron with respect to another is defined by the relation

$$4\pi r^2 \rho_{jk}(t) = P_{jk}(t) \quad (68)$$

and a total electron-electron distribution function by the relation

$$\begin{aligned} P(t) &= \sum_j \sum_{k \neq j} P_{jk}(t) \\ &= \sum_j \sum_k P_{jk}(t) - N\delta(t), \end{aligned} \quad (69)$$

where $\delta(t)$ is the usual Dirac delta function and N is the number of electrons. The expression for the total scattered intensity is now

given as

$$I/I_{cl} = \left\{ \int_0^\infty P(t) \sin \frac{\mu t}{\mu t} dt + N \right\} . \quad (70)$$

Taking the Fourier transform of Equation (70) then gives

$$P(t)/t = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mu [I/I_{cl} - N] \sin \mu t d\mu \quad (71)$$

for the total electron-electron distribution function. Lack of experimental intensity measurements to $(\sin \alpha)/\lambda = \infty$, which are required in both Equations (63) and (71), can be treated by a procedure suggested by Hauptman and Karle [20].

Equation (71) suggests a method for determining a two-electron property experimentally. The function $P(t)$ is difficult to calculate theoretically and it seems reasonable that an experimental measure of the total intensity would afford a more accurate determination of $P(t)$ than would a calculation based on one-electron wavefunctions.

Determination of Electronic Energies from Scattering Data

Total electronic energies can be found from the measurement of scattered x-ray intensities, but in the light of better alternative experimental methods the results may not be competitive. The method is described in the following manner. The non-relativistic Hamiltonian operator for an atom or ion is

$$H = \sum_j [T + U_p]_j + \sum_j \sum_{k < j} U_{jk} \quad (72)$$

where T_j and U_{pj} represent the kinetic energy and electron-nuclear potential operators with U_{jk} the electron-electron repulsion operator. Thus the average potential energies are simply

$$\begin{aligned} \sum_p \bar{U}_{pj} &= -e^2 \int_0^\infty \sum_j [D_j(r)/r] dr \\ &= -e^2 \int_0^\infty [D(r)/r] dr \end{aligned} \quad (73)$$

and

$$\begin{aligned} \sum_j \sum_{k \neq j} \bar{U}_{jk} &= e^2 \int_0^\infty \sum_j \sum_{k \neq j} [P_{jk}(t)/t] dt \\ &= e^2 \int_0^\infty [P(t)/t] dt \end{aligned} \quad (74)$$

with the total energy given by the virial theorem,

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_p U_{pi} + \sum_j \sum_{k \neq j} \bar{U}_{jk} \right\} \\ &= \frac{e^2}{2} \left\{ \int_0^\infty [P(t)/t] dt - \int_0^\infty [D(r)/r] dr \right\} . \end{aligned} \quad (75)$$

The total energy calculated in this fashion accounts for the correlation energy, which is difficult to determine theoretically.

Validity of Results

The accuracy of the expectation values calculated will now be considered. In order not to become involved in a tabulation of values, either theoretical or experimental, the discussion of the present results will mainly depend on a theoretical rather than a comparison approach.

As pointed out by Goodisman and Klemperer [18], an approximate wavefunction Φ used in describing a system always gives the energy to a higher degree of accuracy than other properties, since the true wavefunction Ψ is an eigenstate of the energy. The true state function Ψ can be written in terms of the approximate function Φ and a correction function χ chosen orthogonal on the space of Φ , $\langle \chi^* | \Phi \rangle = 0$, by setting

$$\Psi = \left(1 - \frac{\epsilon^2}{2}\right)\Phi + \epsilon\chi . \quad (76)$$

The parameter ϵ is a measure of the deviation of the approximate solution from the exact solution, and always takes the values $0 \leq \epsilon \leq 1$. It rapidly approaches zero for good approximate functions Φ .

Any one-electron property calculated by an approximate function might then be expected to contain a relative error of magnitude ϵ , except for the Hartree-Fock functions where the error is proportional to ϵ^2 . This is a consequence of Brillouin's [7] theorem which states that the first-order correction to the single determinant Hartree-Fock function describing a closed shell system is orthogonal to the Hartree-Fock function in the coordinates of two electrons. This means that

any correction to the expectation value of a one-electron operator Q computed from a Hartree-Fock function Φ will only contain terms in ϵ^2 and higher. The correction to second order for the expectation value of $Q = \sum_i Q_i(r_i)$ can be illustrated from Equation (76) by writing

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle_{\text{approximate}} &= \int \Phi^* Q \Phi d\tau \\ &= \langle Q \rangle_{\text{exact}} - \epsilon \left[\int \chi^* Q \Psi d\tau + \int \Psi^* Q \chi d\tau \right] \\ &\quad + \epsilon^2 \left[\langle Q \rangle_{\text{exact}} + \int \chi^* Q \chi d\tau \right] \end{aligned} \quad (77)$$

which gives

$$\langle Q \rangle_{\text{approximate}} = \langle Q \rangle_{\text{exact}} + \epsilon^2 \left[\langle Q \rangle_{\text{exact}} + \int \chi^* Q \chi d\tau \right] \quad (78)$$

because the integrals $\langle \chi | Q | \Psi \rangle$ reduce to a sum of integrals

$$\langle \chi | Q | \Psi \rangle = \sum_i \int \Phi^*(r_1 \dots r_n) Q(r_i) \chi(r_1, \dots, r_n) d\tau_1 \dots d\tau_n \quad (79)$$

each of which then vanishes by application of Brillouin's theorem.

It is generally accepted that Hartree-Fock wavefunctions define a well-averaged environment for the individual electrons, making them suitable for the determination of one-electron properties. However, it does not necessarily follow that all one-electron operators will yield expectation values with the same degree of accuracy.

Although the one-electron operators only depend upon an average distribution, a particular one-electron operator may act with a different weight on different space regions over which the wavefunction is defined. If the function is poorly defined over the principal regions on which the operator acts, then the expectation values will be poor. The domain of definition of the operator, $\sum_j \exp(i\vec{k}\vec{s} \cdot \vec{r}_j)$, giving the expectation values for the coherent scattering factors and intensities is seen to be the same as that for the total wavefunctions from which they were computed, namely $0 \leq \varphi \leq \pi$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$, $0 \leq r < \infty$. It was previously shown that the coherent scattering was directly related to the radial distribution function, a function which is well represented* in the Hartree-Fock approximation.

In view of Brillouin's theorem and the discussion regarding the accuracy of one-electron properties calculated from approximate wavefunctions, it is evident that the accuracy of the coherent scattering factors listed in the appendices is dependent upon the extent to which the analytical functions represent the true state functions Ψ . A convenient measure of the deviation from exact values of one-electron properties calculated from the analytical functions is provided from the magnitude of ϵ^2 . As seen from Equation (76), an accurate determination of ϵ presupposes a knowledge of the exact state function Ψ . Estimates** of ϵ should therefore be made before passing judgment

* For a discussion of radial probability plots, reference can be made to D. R. Hartree, The Calculation of Atomic Structures [19].

** From the coefficients of configuration functions, Goodisman and Klemperer [18] estimate ϵ^2 at .045 for He.

on the ability of these analytical functions to yield accurate one-electron expectation values. In addition, a comparison of several one-electron properties computed from these functions should be made with good experimental values.

Until accurate experimental values for the coherent scattering factors become available or until exact wavefunctions for all the atomic systems considered in the present computations are known, no general attempt can be made to assess the goodness of the present results. However, the present values for the coherent quantities are as good as existing values computed from numerical Hartree-Fock functions.* The results for the coherent quantities tabulated in the appendices represent Hartree-Fock expectation values accurate to at least four significant figures (with the fifth speculative).

The total scattered intensity was seen to depend on the distribution function of one electron with respect to another, that is, on electron correlation. As the analytical Hartree-Fock functions do not account for electron correlation, any two-electron properties computed from them would be expected to be in error. The extent of the error associated with the incoherent scattering factor will depend on the relative weight of the contributions of the two-electron and one-electron operators to the expectation value. This is readily

* Rather extensive tabulations are required to demonstrate this point. Comparison of present results can in some cases be made with those values computed from numerical Hartree-Fock functions. In particular, the papers of A. J. Freeman [15,16] provide results for some of the metals and metallic ions of the first row transition elements.

illustrated by considering the equations for the total scattered intensity,

$$\begin{aligned} I/I_{c\ell} &= F^2(\mu) + S(\mu) \\ &= \left\{ \int_0^\infty P(t) \sin \frac{\mu t}{\mu t} dt + N \right\} , \end{aligned} \quad (80)$$

and the equation for the coherent intensity,

$$I_c/I_{c\ell} = F^2(\mu) = \left[\int_0^\infty D(r) \sin \frac{\mu r}{\mu r} dr \right]^2 . \quad (81)$$

Solving for $S(\mu)$ gives

$$S(\mu) = I_i/I_{c\ell} = N + \int_0^\infty P(t) \sin \frac{\mu t}{\mu t} dt - \left[\int_0^\infty D(r) \sin \frac{\mu r}{\mu r} dr \right]^2 . \quad (82)$$

Equation (82) states that the expectation value for $S(\mu)$ is given as the difference of the total intensity, a two-electron property, and the square of a one-electron property, the coherent scattering factor. However, as the number of electrons increases, the coherent intensity rapidly approaches the total intensity, thereby implying that the dominant contributions to the incoherent scattering factor (intensity) are due to the one-electron operator. The dominant contribution to the incoherent intensity comes from the two-electron operator only if the scattering system contains a relatively small number of electrons. The following table lists the ratio, $[F^2(\mu) + S(\mu)]/F^2(\mu)$ of the total to the coherently scattered x-ray intensities for the neutral atoms He - Kr, calculated at a value of $(\sin \alpha)/\lambda = 0.300$.

Table 2. Ratio of Total to Coherent Scattered X-Ray Intensities
for the Atoms He - Kr

Atom	Ratio	Atom	Ratio	Atom	Ratio
He	2.2793	Si	1.0856	Fe	1.0298
Li	1.7992	P	1.0915	Co	1.0268
Be	1.8712	S	1.0828	Ni	1.0240
B	1.8223	Cl	1.0777	Cu	1.0217
C	1.60032	Ar	1.0709	Zn	1.0196
N	1.3870	K	1.0637	Ga	1.0187
O	1.2532	Ca	1.0584	Ge	1.0182
F	1.1671	Sc	1.0527	As	1.0179
Ne	1.1156	Ti	1.0472	Se	1.0177
Na	1.0934	V	1.0420	Br	1.0174
Mg	1.0861	Cr	1.0374	Kr	1.0171
Al	1.0847	Mn	1.0332		

At least for the heavier elements, Table 2 clearly indicates that the major portion of the total scattered intensity corresponds to radiation which has been elastically scattered. For the case of oxygen, the ratio of the coherent to the total intensity is already 80% , for the present value of the scattering variable. At a smaller scattering angle, the contribution of the coherent intensity to the total intensity would be even greater; and in the limiting case, $(\sin \alpha)/\lambda = 0$, the total intensity would be completely represented by the coherent contribution.

It is noticed that in going from Li to Be, the ratio increases, as it does for the sequence Al - Si - P. The general trend is to a decreasing ratio with increasing number of electrons, implying that coherent contributions to the total intensity are indeed dominant. These apparent anomalies must be due to an increase in the contribution of the incoherent scattering to the total, but in view of the fact that electrons are being added to partially filled shells, the behaviour may possibly be interpreted as a manifestation of electron correlation. Similarly, the change in the ratio on going from Ne to Na is .0222, but is only .0073 for Na to Mg. A lesser effect is observed for the sequence Ar - K, K - Ca, where the ratio changes are .0072 and .0053, respectively. Similar trends are noticed in the changes Ca - Sc, Sc - Ti, and Zn - Ga, Ga - Ge. In all cases the change in the ratio is more pronounced when a shell begins to be occupied with the change then being slower as the occupation of the shell increases. The same effect is noted in the 3d shell of the transition elements where the change in ratio monotonically decreases until the shell is half-filled at Mn, increases from Mn to Fe, and then monotonically decreases until the shell is filled at Zn.

In the absence of the electron correlation, the ratio differences should form a uniformly decreasing sequence from He to Kr. That fluctuations within a given shell are not as marked as those encountered on going from a filled shell to an open shell with one electron is taken as evidence for the effects of electron correlation on the total scattering.

The innermost electrons, especially in the heavier elements, contribute most heavily to the coherent and hence the total scattered intensity. On the other hand, the increases in the ratios for Li - Be and Al - Sc - P serve to illustrate that contributions from outermost shells are important to the incoherent intensity.

The ratios listed in Table 2 indicate that incoherently scattered radiation corresponds to a significant portion of the total scattered radiation, at least for the lighter atoms. Although the ratios were calculated with values determined from approximate wavefunctions, Table 2 gives an indication of the magnitude of the necessary corrections to be applied to coherent scattering factors determined from experimental measurements of total scattered intensities. In order to assess the goodness of the present results for the incoherent scattering factors, comparison will be made with the expectation values calculated by Bartell and Gavin [1, 2] from a correlated function which accounts for 92.1% of the correlation energy. The comparison will be made for helium only, since the above table indicates that for this atom the incoherently scattered radiation contributes the major portion to the total.

Table 3. Incoherent Scattering factors, $S(\mu)$, for Helium

$(\sin \alpha)/\lambda, \text{ \AA}^{-1}$	Hartree-Fock ^a $\varphi(r_1)\varphi(r_2)$	Roothaan-Weiss ^b $\varphi(r_1)\varphi(r_2)\chi(r_{12})$	Relative Error (%)
0.025	0.021579	0.02052	5.15
0.050	0.084754	0.08032	5.39
0.075	0.18421	0.1744	5.61
0.100	0.31224	0.2954	5.70
0.125	0.45981	0.4348	5.75
0.150	0.61780	0.5840	5.80
0.175	0.77797	0.7355	5.74
0.200	0.93363	0.8830	5.72
0.250	1.2136	1.1485	5.68
0.300	1.4380	1.3669	5.20
0.400	1.7274	1.6621	3.92
0.500	1.8705	1.8219	2.67
0.600	1.9377	1.9052	1.70
0.700	1.9692	1.9485	1.06
0.800	1.9843	1.9712	0.665

^a Present calculation, using the analytical Hartree-Fock function (0% of correlation energy) of Clementi [8].

^b 92.1% of correlation energy, reference [42].

The results of the present calculation are in relatively good agreement with those from the correlated function, showing a maximum

relative error of 5.80% at $(\sin \alpha)/\lambda = 0.175$.

For helium, it is observed that the values of $S(\mu)$ computed from the analytical function are larger than those evaluated from the correlated function. However, any statement regarding the accuracy of the values of $S(\mu)$ for the remaining atoms Li - Kr must again be based on a comparison with values computed from accurate functions, or on a comparison with experimental results. As neither experimental values nor exact wavefunctions are available for all the systems considered in these calculations, a general assessment of the goodness of the values of $S(\mu)$ as calculated from Clementi's functions is not possible.

The discussion of the results for the incoherent terms involved values computed from Equation (25), which is in effect a zero-order equation with respect to contributions from excited states. Reference can be made to the work of Bonham [5] for corrections to third order. As pointed out by Bonham, these corrections are important in the case of low-energy incident radiation or heavy atoms, where the first ionization potentials are low. The effects of chemical bonding on the scattering factors has been discussed by McWeeny [37]. Polarization and relativistic effects have not as yet been completely assessed.

Even though Equations (24) and (25) of the theory section were derived for gaseous atoms, they can be applied to crystals and molecules if the appropriate many-electron state functions for these systems are known. Until these functions become available, the free

atom scattering factors will have to be used when dealing with molecules and crystals. For crystals with large numbers of well-ordered atoms, the coherent scattering factors given here should be of particular value in the calculation of total intensities. Correlation effects in crystals would not be expected to extend beyond nearest neighbors, and for well-ordered crystals their effects should be insignificant.

BIBLIOGRAPHY

1. L. S. Bartell and R. M. Gavin, Jr. J. Chem. Phys. 43, 856 (1965).
2. L. S. Bartell and R. M. Gavin, Jr. J. Am. Chem. Soc. 86, 3493 (1964).
3. J. Berguis, I. M. Haanappel, M. Potters, B. O. Loopstra, C. H. MacGillavry, and A. L. Veenendaal. Acta Cryst. 8, 478 (1955).
4. R. A. Bonham. J. Chem. Phys. 43, 1460 (1965).
5. R. A. Bonham and T. G. Strand. J. Chem. Phys. 39, 2200 (1963).
6. G. Breit. Phys. Rev. 27, 262 (1924).
7. L. Brillouin. Act. Sci. et Ind. Nos. 71, 159, 160 (1933-34).
8. E. Clementi. "Tables of Atomic Functions." International Business Machines Corporation, San Jose, California, 1965.
9. A. H. Compton. Phys. Rev. 22, 409 (1923).
10. E. U. Condon and G. H. Shortley. "Theory of Atomic Spectra." The University Press, Cambridge 1964.
11. M. Cornille and M. Roux. Compt. Rend. Acad. Sci. (Paris) 259, 1815 (1964).
12. A. R. Edmonds. "Angular Momentum in Quantum Mechanics." Princeton University Press, Princeton, N. J., 1957.
13. E. Fermi. Rev. Mod. Phys. 4, 87 (1932).
14. A. J. Freeman. Phys. Rev. 113, 169 (1959).
15. A. J. Freeman. Acta Cryst. 12, 261 (1959).
16. A. J. Freeman and J. H. Wood. Acta Cryst. 12, 271 (1959).
17. J. Gjonnes. J. Phys. Soc. Japan Suppl. 2, 17, 137 (1962).
18. J. Goodisman and W. Klemperer. J. Chem. Phys. 38, 721 (1963).
19. D. R. Hartree. "The Calculation of Atomic Structures." John Wiley and Sons, Inc., London, 1957.
20. H. Hauptman and J. Karle. Phys. Rev. 77, 491 (1950).

21. F. J. Hildebrand. "Advanced Calculus for Applications." Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1964.
22. D. Hodgkin, J. Pickworth, J. H. Robertson, R. J. Prosen, R. A. Sparks and K. N. Trueblood, Proc. Roy. Soc. A 251, 306 (1959).
23. R. P. Hurst. Acta Cryst. 13, 634 (1960).
24. R. P. Hurst, J. Miller, and F. A. Matsen. Acta Cryst. 11, 320 (1958).
25. J. A. Ibers. Acta Cryst. 11, 178 (1958).
26. T. Iijima, R. A. Bonham, and T. Ando. J. Phys. Chem. 67 1472 (1963).
27. R. W. James. "The Optical Principles of the Diffraction of X-rays." G. Bell and Sons, London, 1948.
28. R. W. James and G. W. Brindley. Phil. Mag. 12, 81 (1931).
29. D. T. Keating and G. H. Vineyard. Acta Cryst. 2, 895 (1956).
30. C. Kittel. Introduction to Solid State Physics." John Wiley and Sons, Inc., New York, 1956.
31. O. Klein. Z. Physik 41, 407 (1927).
32. W. Lamb. Phys. Rev. 55, 190 (1939).
33. G. Malli and S. Fraga. Theoret. Chim. Acta (Berlin) (in press).
34. G. Malli and S. Fraga. Theoret. Chim. Acta (Berlin) (in press).
35. G. Malli and S. Fraga. To be published.
36. G. Malli. Can. J. Phys. 44, 3121 (1966).
37. R. McWeeny. Acta Cryst. 4, 513 (1951).
38. A. Messiah. "Quantum Mechanics," vol. 2, North Holland Publishing Company. Amsterdam, 1962.
39. N. F. Matt and H. S. W. Massey. "The Theory of Atomic Collisions." Oxford University Press, London, 1949.
40. R. F. Pohler and H. P. Hanson. J. Chem. Phys. 42, 2347 (1965).
41. C. C. J. Roothaan, L. M. Sachs and A. W. Weiss. Rev. Mod. Phys. 32, 186 (1960).
42. C. C. J. Roothaan and A. W. Weiss, Rev. Mod. Phys. 32, 194 (1960).
43. M. L. Rustgi and P. Tiwari. J. Chem. Phys. 39, 2590 (1963).

44. E. Rutherford. Phil. Mag. 21, 669 (1911).
45. J. N. Silverman, O. Platas, and F. A. Matsen. Acta Cryst. 13, 539 (1960).
46. T. G. Strand and R. A. Bonham, J. Chem. Phys. 40, 1686 (1964).
47. J. J. Thomson. "Conduction of Electricity Through Gases." Cambridge University Press, Cambridge, 1906.
48. I. Waller and D. R. Hartree. Proc. Roy. Soc. (London) A124, 119 (1929).
49. G. Wentzel. Z. Physik 43, 779 (1927).
50. C. M. Wamack, Jr., J. N. Silverman, and F. A. Matsen. Acta Cryst. 14, 774 (1961).
51. A. C. Zemach and R. J. Glauber. Phys. Rev. 101, 118 (1956).
52. A. C. Zemach and R. J. Glauber. Phys. Rev. 101, 129 (1956).

Explanation of Appendices

Table 1 of Appendix 1 collects the values of the coherent electron scattering factor, $f_e^{(1)}(0)$, for the positive ions, neutral atoms and negative ions He to Kr. Table 2 of Appendix 1 lists the values for the coherent x-ray scattering factor, F , coherent x-ray scattered intensity, F^2 , incoherent electron and x-ray scattering factor S , and the square of the electron scattering factor, $(N - F)$, for all the neutral atoms He to Kr. The column at the left hand of each page lists the range of values of the scattering variable, $(\sin \alpha)/\lambda$, in \AA^{-1} ; for which the evaluations were performed.

The remaining tables of Appendices 2 and 3 collect values for the coherent and incoherent scattered x-ray intensities [a]. The column headings are as follows:

Coherent scattered x-ray intensity; $F^2 \equiv (SF(I,I))^{**2}$

Incoherent scattered x-ray intensity, $S \equiv Z - F$ [b]

Sum of the squares of the diagonal elements; $S(F(I,I))^{**2}$ [c]

Sum of the squares of diagonal and non-diagonal elements; $\Sigma \equiv S(F(I,J))^{**2}$

Ratio of the incoherent to coherent x-ray scattered intensity; INC/COH

The tables of Appendix 2 list the above values for positive ions, whereas the tables of Appendix 3 present values for negative ions. The range of the scattering variable, $(\sin \alpha)/\lambda$, is the same for all tables of Appendices 2 and 3 as that for Table 2 of Appendix 1.

[a] The corresponding values for the coherent x-ray scattering factors and the coherent electron scattering factors and intensities can be found from the values of F^2 .

[b] This F term corresponds to the complete summation term, Σ , of Equation (25).

[c] This is the summation term, $\Sigma_i |f_{ii}|^2$, of Equation (25).

Appendix 1

Table 1. Atomic factor $f_e^{(1)}(0)$ (in \AA^0) electron scattering for positive ions, neutral atoms, and negative ions. ^{a)}

System	Positive Ion		Neutral Atom		Negative Ion	
	State	$f_e^{(1)}(0)$	State	$f_e^{(1)}(0)$	State	$f_e^{(1)}(0)$
He			1_S	0.42		
Li	1_S	0.16	2_S	3.29	1_S	15.51
Be	2_S	1.16	1_S	3.05		
B	1_S	1.40	2_P	2.79	3_P	7.02
C	2_P	1.42	3_P	2.43	4_S	4.64
N	3_P	1.40	4_S	2.13	3_P	3.93
O	4_S	1.30	3_P	1.97	2_P	3.30
F	3_P	1.24	2_P	1.81	1_S	2.81
Ne	2_P	1.20	1_S	1.65		
Na	1_S	1.13	2_S	4.79	1_S	17.42
Mg	2_S	2.50	1_S	5.22		
Al	1_S	3.07	2_P	5.90	3_P	13.08
Si	2_P	3.60	3_P	5.69	4_S	9.60
P	3_P	3.70	4_S	5.34	3_P	8.58
S	4_S	3.70	3_P	5.14	2_P	7.58
Cl	3_P	3.64	2_P	4.87	1_S	6.75
A	2_P	3.60	1_S	4.59		
K	1_S	3.44	2_S	9.03	1_S	28.14

Table 1 (continued)

System	Positive Ion		Neutral Atom		Negative Ion	
	State	$f_e^{(1)}(0)$	State	$f_e^{(1)}(0)$	State	$f_e^{(1)}(0)$
Ca	2_S	5.51	1_S	9.98		
Sc	3_F	4.04	2_D	9.38	3_F	19.63
Ti	4_F	3.92	3_F	8.85	4_F	19.19
V	5_D	3.81	4_F	8.39	5_D	18.31
Cr	6_S	3.70	7_S	6.70	6_S	17.50
Mn	5_D	3.63	6_S	7.60	5_D	16.28
Fe	4_F	3.54	5_D	7.26	4_F	15.56
Co	3_F	3.44	4_F	6.94	3_F	14.63
Ni	2_D	3.40	3_F	6.67	2_S	8.57
Cu	1_S	3.30	2_S	5.90	1_S	13.38
Zn	2_S	4.00	1_S	6.20		
Ga	1_S	4.50	2_P	7.21	3_P	14.78
Ge	2_P	5.10	3_P	7.33	4_S	11.42
As	3_P	5.49	4_S	7.24	3_P	10.80
Se	4_S	5.50	3_P	7.30	2_P	10.09
Br	3_P	5.62	2_P	7.14	1_S	9.39
Kr	2_P	5.64	1_S	7.00		

a) Values calculated from the analytical Hartree-Fock functions of Clementi [8] and Malli [36]. Strand and Bonham [46] have also calculated these values for neutral atoms.

HE		1S(2)	1S				
F		S		F**2		(N-F)**2	
0.000	0.20000E 01	-0.93937E-04	0.40002E 01	0.22060E-08			
0.025	0.19892E 01	0.21579E-01	0.39568E 01	0.11705E-03			
0.050	0.19572E 01	0.84754E-01	0.38305E 01	0.18349E-02			
0.075	0.19057E 01	0.18421E 00	0.36316E 01	0.88982E-02			
0.100	0.18373E 01	0.31224E 00	0.33755E 01	0.26484E-01			
0.125	0.17551E 01	0.45981E 00	0.30804E 01	0.59975E-01			
0.150	0.16626E 01	0.61780E 00	0.27644E 01	0.11331E 00			
0.175	0.15633E 01	0.77797E 00	0.24441E 01	0.19067E 00			
0.200	0.14604E 01	0.93363E 00	0.21327E 01	0.29118E 00			
0.225	0.13566E 01	0.10799E 01	0.18403E 01	0.41402E 00			
0.250	0.12541E 01	0.12136E 01	0.15729E 01	0.55629E 00			
0.275	0.11549E 01	0.13331E 01	0.13339E 01	0.71414E 00			
0.300	0.10602E 01	0.14380E 01	0.11240E 01	0.88323E 00			
0.325	0.97080E 00	0.15288E 01	0.94246E 00	0.10592E 01			
0.350	0.88725E 00	0.16064E 01	0.78722E 00	0.12382E 01			
0.375	0.80976E 00	0.16721E 01	0.65572E 00	0.14167E 01			
0.400	0.73834E 00	0.17274E 01	0.54515E 00	0.15918E 01			
0.425	0.67284E 00	0.17736E 01	0.45271E 00	0.17614E 01			
0.450	0.61298E 00	0.18121E 01	0.37575E 00	0.19238E 01			
0.475	0.55846E 00	0.18441E 01	0.31188E 00	0.20780E 01			
0.500	0.50891E 00	0.18705E 01	0.25899E 00	0.22233E 01			
0.550	0.42320E 00	0.19104E 01	0.17910E 00	0.24863E 01			
0.600	0.35289E 00	0.19377E 01	0.12453E 00	0.27130E 01			
0.650	0.29528E 00	0.19564E 01	0.87192E-01	0.29061E 01			
0.700	0.24804E 00	0.19692E 01	0.61525E-01	0.30694E 01			
0.750	0.20923E 00	0.19781E 01	0.43776E-01	0.32069E 01			
0.800	0.17724E 00	0.19843E 01	0.31415E-01	0.33224E 01			
0.850	0.15080E 00	0.19886E 01	0.22740E-01	0.34196E 01			
0.900	0.12885E 00	0.19917E 01	0.16602E-01	0.35012E 01			
0.950	0.11056E 00	0.19939E 01	0.12223E-01	0.35700E 01			
1.000	0.95255E-01	0.19955E 01	0.90736E-02	0.36281E 01			
1.100	0.71555E-01	0.19974E 01	0.51201E-02	0.37189E 01			
1.200	0.54562E-01	0.19985E 01	0.29770E-02	0.37847E 01			
1.300	0.42186E-01	0.19991E 01	0.17797E-02	0.38330E 01			
1.400	0.33040E-01	0.19995E 01	0.10916E-02	0.38689E 01			
1.500	0.26186E-01	0.19997E 01	0.68569E-03	0.38959E 01			
1.600	0.20982E-01	0.19998E 01	0.44025E-03	0.39165E 01			
1.700	0.16984E-01	0.19999E 01	0.28845E-03	0.39324E 01			
1.800	0.13877E-01	0.19999E 01	0.19256E-03	0.39447E 01			
1.900	0.11437E-01	0.19999E 01	0.13080E-03	0.39544E 01			
2.000	0.95020E-02	0.20000E 01	0.90288E-04	0.39621E 01			
2.100	0.79536E-02	0.20000E 01	0.63260E-04	0.39682E 01			
2.200	0.67039E-02	0.20000E 01	0.44942E-04	0.39732E 01			
2.300	0.56872E-02	0.20000E 01	0.32344E-04	0.39773E 01			
2.400	0.48538E-02	0.20000E 01	0.23560E-04	0.39806E 01			
2.500	0.41660E-02	0.20000E 01	0.17356E-04	0.39834E 01			
2.700	0.31169E-02	0.20000E 01	0.97152E-05	0.39875E 01			
2.900	0.23758E-02	0.20000E 01	0.56444E-05	0.39905E 01			
3.100	0.18410E-02	0.20000E 01	0.33891E-05	0.39926E 01			
3.300	0.14476E-02	0.20000E 01	0.20956E-05	0.39942E 01			
3.500	0.11534E-02	0.20000E 01	0.13302E-05	0.39954E 01			

LI		1S(2)2S(1)		2S			
F		S		F**2		(N-F)**2	
0.000	0.30000E 01	01	-0.41574E-04	0.90001E 01	01	0.43149E-09	
0.025	0.29177E 01	01	0.15851E 00	0.85129E 01	01	0.67753E-02	
0.050	0.27075E 01	01	0.50856E 00	0.73305E 01	01	0.85562E-01	
0.075	0.24501E 01	01	0.83532E 00	0.60028E 01	01	0.30244E 00	
0.100	0.22150E 01	01	0.10476E 01	0.49060E 01	01	0.61629E 00	
0.125	0.20331E 01	01	0.11737E 01	0.41336E 01	01	0.93483E 00	
0.150	0.19036E 01	01	0.12651E 01	0.36237E 01	01	0.12021E 01	
0.175	0.18116E 01	01	0.13512E 01	0.32819E 01	01	0.14123E 01	
0.200	0.17415E 01	01	0.14412E 01	0.30330E 01	01	0.15837E 01	
0.225	0.16820E 01	01	0.15358E 01	0.28290E 01	01	0.17372E 01	
0.250	0.16260E 01	01	0.16331E 01	0.26437E 01	01	0.18880E 01	
0.275	0.15700E 01	01	0.17313E 01	0.24648E 01	01	0.20450E 01	
0.300	0.15126E 01	01	0.18286E 01	0.22879E 01	01	0.22124E 01	
0.325	0.14535E 01	01	0.19237E 01	0.21127E 01	01	0.23917E 01	
0.350	0.13931E 01	01	0.20156E 01	0.19406E 01	01	0.25823E 01	
0.375	0.13318E 01	01	0.21039E 01	0.17736E 01	01	0.27830E 01	
0.400	0.12703E 01	01	0.218...E 01	0.16136E 01	01	0.29919E 01	
0.425	0.12091E 01	01	0.226...E 01	0.14620E 01	01	0.32072E 01	
0.450	0.11488E 01	01	0.23371E 01	0.13199E 01	01	0.34258E 01	
0.475	0.10898E 01	01	0.24042E 01	0.11877E 01	01	0.36487E 01	
0.500	0.10324E 01	01	0.24658E 01	0.10659E 01	01	0.38713E 01	
0.550	0.92345E 00	00	0.25731E 01	0.85277E 00	00	0.43120E 01	
0.600	0.82319E 00	00	0.26610E 01	0.67764E 00	00	0.47385E 01	
0.650	0.73215E 00	00	0.27319E 01	0.53604E 00	00	0.51432E 01	
0.700	0.65028E 00	00	0.27885E 01	0.42286E 00	00	0.55212E 01	
0.750	0.57719E 00	00	0.28334E 01	0.33315E 00	00	0.58700E 01	
0.800	0.51227E 00	00	0.28688E 01	0.26242E 00	00	0.61888E 01	
0.850	0.45483E 00	00	0.28966E 01	0.20687E 00	00	0.64779E 01	
0.900	0.40413E 00	00	0.29183E 01	0.16332E 00	00	0.67385E 01	
0.950	0.35945E 00	00	0.29354E 01	0.12921E 00	00	0.69725E 01	
1.000	0.32011E 00	00	0.29488E 01	0.10247E 00	00	0.71818E 01	
1.100	0.25499E 00	00	0.29675E 01	0.65020E-01	01	0.75351E 01	
1.200	0.20444E 00	00	0.29791E 01	0.41797E-01	01	0.78151E 01	
1.300	0.16506E 00	00	0.29864E 01	0.27245E-01	01	0.80369E 01	
1.400	0.13421E 00	00	0.29910E 01	0.18013E-01	01	0.82127E 01	
1.500	0.10990E 00	00	0.29940E 01	0.12079E-01	01	0.83527E 01	
1.600	0.90621E-01	01	0.29959E 01	0.82122E-02	02	0.84645E 01	
1.700	0.75225E-01	01	0.29972E 01	0.56588E-02	02	0.85543E 01	
1.800	0.62848E-01	01	0.29980E 01	0.39499E-02	02	0.86269E 01	
1.900	0.52832E-01	01	0.29986E 01	0.27912E-02	02	0.86858E 01	
2.000	0.44675E-01	01	0.29990E 01	0.19958E-02	02	0.87339E 01	
2.100	0.37989E-01	01	0.29993E 01	0.14431E-02	02	0.87735E 01	
2.200	0.32475E-01	01	0.29995E 01	0.10546E-02	02	0.88062E 01	
2.300	0.27903E-01	01	0.29996E 01	0.77857E-03	03	0.88334E 01	
2.400	0.24089E-01	01	0.29997E 01	0.58029E-03	03	0.88560E 01	
2.500	0.20892E-01	01	0.29998E 01	0.43646E-03	03	0.88751E 01	
2.700	0.15915E-01	01	0.29999E 01	0.25328E-03	03	0.89048E 01	
2.900	0.12314E-01	01	0.29999E 01	0.15162E-03	03	0.89263E 01	
3.100	0.96624E-02	02	0.30000E 01	0.93362E-04	04	0.89421E 01	
3.300	0.76792E-02	02	0.30000E 01	0.58970E-04	04	0.89540E 01	
3.500	0.61742E-02	02	0.30000E 01	0.38120E-04	04	0.89630E 01	

BE 1S(2)2S(2) 1S

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.40001E 01	-0.13191E-03	0.16001E 02	0.43458E-08
0.025	0.39220E 01	0.15316E 00	0.15382E 02	0.60873E-02
0.050	0.37067E 01	0.54602E 00	0.13739E 02	0.86038E-01
0.075	0.34021E 01	0.10279E 01	0.11575E 02	0.35744E 00
0.100	0.30651E 01	0.14628E 01	0.93948E 01	0.87405E 00
0.125	0.27424E 01	0.17865E 01	0.75209E 01	0.15815E 01
0.150	0.24624E 01	0.20004E 01	0.60635E 01	0.23642E 01
0.175	0.22354E 01	0.21364E 01	0.49971E 01	0.31137E 01
0.200	0.20596E 01	0.22281E 01	0.42421E 01	0.37651E 01
0.225	0.19269E 01	0.22995E 01	0.37131E 01	0.42976E 01
0.250	0.18274E 01	0.23643E 01	0.33395E 01	0.47201E 01
0.275	0.17517E 01	0.24284E 01	0.30685E 01	0.50548E 01
0.300	0.16921E 01	0.24942E 01	0.28632E 01	0.53264E 01
0.325	0.16427E 01	0.25616E 01	0.26986E 01	0.55567E 01
0.350	0.15994E 01	0.26304E 01	0.25581E 01	0.57629E 01
0.375	0.15592E 01	0.26998E 01	0.24312E 01	0.59574E 01
0.400	0.15204E 01	0.27692E 01	0.23115E 01	0.61486E 01
0.425	0.14817E 01	0.28380E 01	0.21954E 01	0.63419E 01
0.450	0.14426E 01	0.29058E 01	0.20810E 01	0.65404E 01
0.475	0.14028E 01	0.29722E 01	0.19677E 01	0.67456E 01
0.500	0.13622E 01	0.30368E 01	0.18556E 01	0.69580E 01
0.550	0.12793E 01	0.31595E 01	0.16365E 01	0.74024E 01
0.600	0.11951E 01	0.32724E 01	0.14283E 01	0.78674E 01
0.650	0.11114E 01	0.33744E 01	0.12352E 01	0.83439E 01
0.700	0.10296E 01	0.34654E 01	0.10602E 01	0.88230E 01
0.750	0.95092E 00	0.35453E 01	0.90425E 00	0.92969E 01
0.800	0.87605E 00	0.36149E 01	0.76746E 00	0.97591E 01
0.850	0.80554E 00	0.36748E 01	0.64889E 00	0.10205E 02
0.900	0.73964E 00	0.37261E 01	0.54706E 00	0.10630E 02
0.950	0.67843E 00	0.37697E 01	0.46027E 00	0.11033E 02
1.000	0.62187E 00	0.38066E 01	0.38672E 00	0.11412E 02
1.100	0.52202E 00	0.38638E 01	0.27251E 00	0.12096E 02
1.200	0.43831E 00	0.39040E 01	0.19211E 00	0.12686E 02
1.300	0.36858E 00	0.39321E 01	0.13585E 00	0.13187E 02
1.400	0.31068E 00	0.39518E 01	0.96523E-01	0.13611E 02
1.500	0.26267E 00	0.39655E 01	0.68997E-01	0.13968E 02
1.600	0.22284E 00	0.39752E 01	0.49657E-01	0.14267E 02
1.700	0.18974E 00	0.39820E 01	0.36001E-01	0.14518E 02
1.800	0.16217E 00	0.39869E 01	0.26299E-01	0.14729E 02
1.900	0.13914E 00	0.39903E 01	0.19360E-01	0.14906E 02
2.000	0.11984E 00	0.39928E 01	0.14363E-01	0.15056E 02
2.100	0.10362E 00	0.39946E 01	0.10737E-01	0.15182E 02
2.200	0.89925E-01	0.39960E 01	0.80865E-02	0.15289E 02
2.300	0.78328E-01	0.39969E 01	0.61352E-02	0.15380E 02
2.400	0.68470E-01	0.39977E 01	0.46881E-02	0.15457E 02
2.500	0.60059E-01	0.39982E 01	0.36071E-02	0.15523E 02
2.700	0.46671E-01	0.39989E 01	0.21782E-02	0.15629E 02
2.900	0.36721E-01	0.39993E 01	0.13484E-02	0.15708E 02
3.100	0.29228E-01	0.39996E 01	0.85427E-03	0.15767E 02
3.300	0.23513E-01	0.39997E 01	0.55288E-03	0.15812E 02
3.500	0.19104E-01	0.39998E 01	0.35497E-03	0.15848E 02

B 1S(2)2S(2)2P(1) 2P

F			S		F**2		(N-F)**2
0.000	0.50000E	01	0.16391E-04		0.25000E	02	0.67658E-10
0.025	0.49281E	01	0.11730E	00	0.24286E	02	0.51753E-02
0.050	0.47244E	01	0.43634E	00	0.22320E	02	0.75969E-01
0.075	0.44210E	01	0.87719E	00	0.19545E	02	0.33525E 00
0.100	0.40596E	01	0.13518E	01	0.16480E	02	0.88436E 00
0.125	0.36805E	01	0.17945E	01	0.13546E	02	0.17410E 01
0.150	0.33155E	01	0.21709E	01	0.10992E	02	0.28376E 01
0.175	0.29848E	01	0.24724E	01	0.89088E	01	0.40612E 01
0.200	0.26983E	01	0.27056E	01	0.72810E	01	0.52976E 01
0.225	0.24584E	01	0.28838E	01	0.60438E	01	0.64596E 01
0.250	0.22622E	01	0.30209E	01	0.51175E	01	0.74955E 01
0.275	0.21043E	01	0.31295E	01	0.44282E	01	0.83848E 01
0.300	0.19785E	01	0.32189E	01	0.39144E	01	0.91295E 01
0.325	0.18784E	01	0.32960E	01	0.35284E	01	0.97443E 01
0.350	0.17984E	01	0.33655E	01	0.32343E	01	0.10250E 02
0.375	0.17337E	01	0.34303E	01	0.30056E	01	0.10669E 02
0.400	0.16802E	01	0.34922E	01	0.28232E	01	0.11021E 02
0.425	0.16349E	01	0.35522E	01	0.26729E	01	0.11324E 02
0.450	0.15953E	01	0.36110E	01	0.25449E	01	0.11592E 02
0.475	0.15595E	01	0.36688E	01	0.24320E	01	0.11837E 02
0.500	0.15261E	01	0.37258E	01	0.23291E	01	0.12068E 02
0.550	0.14631E	01	0.38372E	01	0.21406E	01	0.12510E 02
0.600	0.14014E	01	0.39446E	01	0.19638E	01	0.12950E 02
0.650	0.13390E	01	0.40474E	01	0.17929E	01	0.13403E 02
0.700	0.12755E	01	0.41446E	01	0.16270E	01	0.13872E 02
0.750	0.12112E	01	0.42356E	01	0.14671E	01	0.14355E 02
0.800	0.11468E	01	0.43200E	01	0.13151E	01	0.14847E 02
0.850	0.10828E	01	0.43975E	01	0.11725E	01	0.15344E 02
0.900	0.10200E	01	0.44680E	01	0.10404E	01	0.15840E 02
0.950	0.95890E	00	0.45317E	01	0.91949E	00	0.16330E 02
1.000	0.89989E	00	0.45889E	01	0.80980E	00	0.16811E 02
1.100	0.78935E	00	0.46851E	01	0.62308E	00	0.17729E 02
1.200	0.68979E	00	0.47603E	01	0.47581E	00	0.18578E 02
1.300	0.60146E	00	0.48181E	01	0.36175E	00	0.19347E 02
1.400	0.52391E	00	0.48621E	01	0.27448E	00	0.20035E 02
1.500	0.45633E	00	0.48955E	01	0.20824E	00	0.20645E 02
1.600	0.39771E	00	0.49207E	01	0.15818E	00	0.21181E 02
1.700	0.34703E	00	0.49396E	01	0.12043E	00	0.21650E 02
1.800	0.30328E	00	0.49539E	01	0.91977E-01		0.22059E 02
1.900	0.26553E	00	0.49647E	01	0.70507E-01		0.22415E 02
2.000	0.23296E	00	0.49728E	01	0.54272E-01		0.22725E 02
2.100	0.20484E	00	0.49790E	01	0.41960E-01		0.22993E 02
2.200	0.18053E	00	0.49837E	01	0.32592E-01		0.23227E 02
2.300	0.15948E	00	0.49873E	01	0.25435E-01		0.23430E 02
2.400	0.14123E	00	0.49900E	01	0.19946E-01		0.23608E 02
2.500	0.12537E	00	0.49921E	01	0.15717E-01		0.23762E 02
2.700	0.99494E-01		0.49950E	01	0.98991E-02		0.24015E 02
2.900	0.79703E-01		0.49968E	01	0.63526E-02		0.24209E 02
3.100	0.64426E-01		0.49979E	01	0.41508E-02		0.24360E 02
3.300	0.52526E-01		0.49986E	01	0.27590E-02		0.24477E 02
3.500	0.43173E-01		0.49991E	01	0.18639E-02		0.24570E 02

C 1S(2)2S(2)2P(2) 3P

F			S		F**2		(N-F)**2	
0.000	0.60000E	01	0.61214E-04		0.36000E	02	0.93496E-09	
0.025	0.59371E	01	0.93130E-01		0.35249E	02	0.39609E-02	
0.050	0.57557E	01	0.35479E 00		0.33128E	02	0.59678E-01	
0.075	0.54761E	01	0.73960E 00		0.29988E	02	0.27446E 00	
0.100	0.51265E	01	0.11910E 01		0.26281E	02	0.76299E 00	
0.125	0.47374E	01	0.16575E 01		0.22443E	02	0.15942E 01	
0.150	0.43366E	01	0.21019E 01		0.18806E	02	0.27668E 01	
0.175	0.39464E	01	0.25025E 01		0.15574E	02	0.42172E 01	
0.200	0.35823E	01	0.28503E 01		0.12833E	02	0.58452E 01	
0.225	0.32536E	01	0.31446E 01		0.10586E	02	0.75430E 01	
0.250	0.29642E	01	0.33897E 01		0.87865E	01	0.92162E 01	
0.275	0.27145E	01	0.35922E 01		0.73687E	01	0.10794E 02	
0.300	0.25024E	01	0.37592E 01		0.62619E	01	0.12233E 02	
0.325	0.23241E	01	0.38978E 01		0.54016E	01	0.13512E 02	
0.350	0.21755E	01	0.40140E 01		0.47330E	01	0.14627E 02	
0.375	0.20523E	01	0.41130E 01		0.42118E	01	0.15585E 02	
0.400	0.19501E	01	0.41990E 01		0.38029E	01	0.16402E 02	
0.425	0.18653E	01	0.42752E 01		0.34794E	01	0.17096E 02	
0.450	0.17946E	01	0.43441E 01		0.32205E	01	0.17686E 02	
0.475	0.17351E	01	0.44076E 01		0.30105E	01	0.18190E 02	
0.500	0.16844E	01	0.44670E 01		0.28372E	01	0.18625E 02	
0.550	0.16020E	01	0.45774E 01		0.25665E	01	0.19342E 02	
0.600	0.15358E	01	0.46804E 01		0.23585E	01	0.19930E 02	
0.650	0.14781E	01	0.47782E 01		0.21849E	01	0.20447E 02	
0.700	0.14247E	01	0.48720E 01		0.20298E	01	0.20933E 02	
0.750	0.13729E	01	0.49618E 01		0.18847E	01	0.21411E 02	
0.800	0.13213E	01	0.50477E 01		0.17459E	01	0.21890E 02	
0.850	0.12695E	01	0.51294E 01		0.16117E	01	0.22377E 02	
0.900	0.12175E	01	0.52066E 01		0.14822E	01	0.22873E 02	
0.950	0.11653E	01	0.52791E 01		0.13578E	01	0.23375E 02	
1.000	0.11132E	01	0.53469E 01		0.12392E	01	0.23881E 02	
1.100	0.10108E	01	0.54679E 01		0.10217E	01	0.24892E 02	
1.200	0.91266E	00	0.55700E 01		0.83294E	00	0.25881E 02	
1.300	0.82046E	00	0.56548E 01		0.67316E	00	0.26828E 02	
1.400	0.73525E	00	0.57241E 01		0.54060E	00	0.27718E 02	
1.500	0.65746E	00	0.57802E 01		0.43226E	00	0.28543E 02	
1.600	0.58711E	00	0.58252E 01		0.34470E	00	0.29299E 02	
1.700	0.52392E	00	0.58611E 01		0.27449E	00	0.29988E 02	
1.800	0.46746E	00	0.58896E 01		0.21852E	00	0.30609E 02	
1.900	0.41720E	00	0.59122E 01		0.17405E	00	0.31158E 02	
2.000	0.37256E	00	0.59300E 01		0.13880E	00	0.31668E 02	
2.100	0.33300E	00	0.59442E 01		0.11089E	00	0.32115E 02	
2.200	0.29796E	00	0.59553E 01		0.88780E-01		0.32513E 02	
2.300	0.26694E	00	0.59642E 01		0.71257E-01		0.32863E 02	
2.400	0.23948E	00	0.59712E 01		0.57351E-01		0.33184E 02	
2.500	0.21516E	00	0.59767E 01		0.46295E-01		0.33464E 02	
2.700	0.17450E	00	0.59847E 01		0.30449E-01		0.33937E 02	
2.900	0.14243E	00	0.59898E 01		0.20287E-01		0.34311E 02	
3.100	0.11703E	00	0.59931E 01		0.13696E-01		0.34609E 02	
3.300	0.96784E-01		0.59953E 01		0.93671E-02		0.34848E 02	
3.500	0.80554E-01		0.59968E 01		0.64889E-02		0.35040E 02	

N 1S(2)2S(2)2P(3) 4S

F			S	F**2		(N-F)**2
0.000	0.70001E	01	-0.12946E-03	0.49001E	02	0.41901E-08
0.025	0.69449E	01	0.76509E-01	0.48231E	02	0.30405E-02
0.050	0.67839E	01	0.29615E 00	0.46022E	02	0.46688E-01
0.075	0.65304E	01	0.63112E 00	0.42647E	02	0.22048E 00
0.100	0.62038E	01	0.10441E 01	0.38487E	02	0.63399E 00
0.125	0.58263E	01	0.14971E 01	0.33945E	02	0.13776E 01
0.150	0.54204E	01	0.19578E 01	0.29381E	02	0.24951E 01
0.175	0.50063E	01	0.24023E 01	0.25063E	02	0.39749E 01
0.200	0.46003E	01	0.28159E 01	0.21162E	02	0.57588E 01
0.225	0.42145E	01	0.31906E 01	0.17762E	02	0.77592E 01
0.250	0.38569E	01	0.35235E 01	0.14876E	02	0.98789E 01
0.275	0.35322E	01	0.38153E 01	0.12476E	02	0.12026E 02
0.300	0.32419E	01	0.40685E 01	0.10510E	02	0.14123E 02
0.325	0.29858E	01	0.42867E 01	0.89149E	01	0.16114E 02
0.350	0.27622E	01	0.44742E 01	0.76295E	01	0.17959E 02
0.375	0.25685E	01	0.46353E 01	0.65970E	01	0.19639E 02
0.400	0.24017E	01	0.47738E 01	0.57683E	01	0.21144E 02
0.425	0.22589E	01	0.48937E 01	0.51024E	01	0.22478E 02
0.450	0.21368E	01	0.49981E 01	0.45657E	01	0.23651E 02
0.475	0.20325E	01	0.50899E 01	0.41312E	01	0.24676E 02
0.500	0.19435E	01	0.51715E 01	0.37773E	01	0.25568E 02
0.550	0.18020E	01	0.53118E 01	0.32471E	01	0.27019E 02
0.600	0.16963E	01	0.54307E 01	0.28775E	01	0.28129E 02
0.650	0.16148E	01	0.55360E 01	0.26076E	01	0.29000E 02
0.700	0.15490E	01	0.56323E 01	0.23994E	01	0.29713E 02
0.750	0.14931E	01	0.57223E 01	0.22293E	01	0.30326E 02
0.800	0.14431E	01	0.58077E 01	0.20825E	01	0.30879E 02
0.850	0.13964E	01	0.58892E 01	0.19499E	01	0.31400E 02
0.900	0.13514E	01	0.59672E 01	0.18263E	01	0.31907E 02
0.950	0.13072E	01	0.60419E 01	0.17087E	01	0.32408E 02
1.000	0.12632E	01	0.61131E 01	0.15957E	01	0.32911E 02
1.100	0.11754E	01	0.62450E 01	0.13816E	01	0.33926E 02
1.200	0.10881E	01	0.63626E 01	0.11840E	01	0.34950E 02
1.300	0.10025E	01	0.64656E 01	0.10049E	01	0.35970E 02
1.400	0.91978E	00	0.65546E 01	0.84600E	00	0.36969E 02
1.500	0.84111E	00	0.66305E 01	0.70746E	00	0.37932E 02
1.600	0.76716E	00	0.66945E 01	0.58853E	00	0.38848E 02
1.700	0.69834E	00	0.67482E 01	0.48768E	00	0.39711E 02
1.800	0.63481E	00	0.67928E 01	0.40299E	00	0.40516E 02
1.900	0.57653E	00	0.68297E 01	0.33239E	00	0.41261E 02
2.000	0.52334E	00	0.68601E 01	0.27388E	00	0.41947E 02
2.100	0.47496E	00	0.68850E 01	0.22559E	00	0.42576E 02
2.200	0.43110E	00	0.69054E 01	0.18584E	00	0.43150E 02
2.300	0.39141E	00	0.69222E 01	0.15320E	00	0.43673E 02
2.400	0.35556E	00	0.69359E 01	0.12642E	00	0.44149E 02
2.500	0.32321E	00	0.69471E 01	0.10447E	00	0.44579E 02
2.700	0.26774E	00	0.69638E 01	0.71684E-01		0.45323E 02
2.900	0.22265E	00	0.69750E 01	0.49573E-01		0.45932E 02
3.100	0.18596E	00	0.69826E 01	0.34582E-01		0.46431E 02
3.300	0.15604E	00	0.69877E 01	0.24347E-01		0.46840E 02
3.500	0.13155E	00	0.69913E 01	0.17305E-01		0.47176E 02

O 1S(2)2S(2)2P(4) 3P

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.79999E	01	0.87976E-04	0.63999E	02	0.19350E-08					
0.025	0.79488E	01	0.69019E-01	0.63184E	02	0.26174E-02					
0.050	0.77991E	01	0.26809E 00	0.60825E	02	0.40372E-01					
0.075	0.75608E	01	0.57623E 00	0.57166E	02	0.19288E 00					
0.100	0.72492E	01	0.96437E 00	0.52551E	02	0.56363E 00					
0.125	0.68824E	01	0.14017E 01	0.47367E	02	0.12491E 01					
0.150	0.64790E	01	0.18607E 01	0.41977E	02	0.23135E 01					
0.175	0.60566E	01	0.23196E 01	0.36683E	02	0.37766E 01					
0.200	0.56307E	01	0.27632E 01	0.31705E	02	0.56136E 01					
0.225	0.52135E	01	0.31815E 01	0.27181E	02	0.77644E 01					
0.250	0.48144E	01	0.35691E 01	0.23178E	02	0.10148E 02					
0.275	0.44396E	01	0.39233E 01	0.19710E	02	0.12676E 02					
0.300	0.40932E	01	0.42434E 01	0.16755E	02	0.15263E 02					
0.325	0.37771E	01	0.45304E 01	0.14266E	02	0.17833E 02					
0.350	0.34914E	01	0.47857E 01	0.12190E	02	0.20327E 02					
0.375	0.32356E	01	0.50115E 01	0.10469E	02	0.22700E 02					
0.400	0.30080E	01	0.52106E 01	0.90481E	01	0.24920E 02					
0.425	0.28067E	01	0.53856E 01	0.78777E	01	0.26970E 02					
0.450	0.26295E	01	0.55392E 01	0.69141E	01	0.28842E 02					
0.475	0.24739E	01	0.56743E 01	0.61203E	01	0.30537E 02					
0.500	0.23378E	01	0.57933E 01	0.54652E	01	0.32061E 02					
0.550	0.21149E	01	0.59922E 01	0.44728E	01	0.34634E 02					
0.600	0.19449E	01	0.61517E 01	0.37825E	01	0.36654E 02					
0.650	0.18144E	01	0.62836E 01	0.32921E	01	0.38261E 02					
0.700	0.17130E	01	0.63965E 01	0.29343E	01	0.39527E 02					
0.750	0.16324E	01	0.64962E 01	0.26647E	01	0.40546E 02					
0.800	0.15665E	01	0.65869E 01	0.24539E	01	0.41390E 02					
0.850	0.15107E	01	0.66710E 01	0.22822E	01	0.42111E 02					
0.900	0.14617E	01	0.67502E 01	0.21366E	01	0.42749E 02					
0.950	0.14172E	01	0.68256E 01	0.20085E	01	0.43333E 02					
1.000	0.13755E	01	0.68977E 01	0.18920E	01	0.43884E 02					
1.100	0.12965E	01	0.70331E 01	0.16808E	01	0.44937E 02					
1.200	0.12198E	01	0.71573E 01	0.14879E	01	0.45971E 02					
1.300	0.11440E	01	0.72702E 01	0.13088E	01	0.47004E 02					
1.400	0.10691E	01	0.73716E 01	0.11429E	01	0.48037E 02					
1.500	0.99561E	00	0.74617E 01	0.99124E	00	0.49061E 02					
1.600	0.92433E	00	0.75409E 01	0.85438E	00	0.50065E 02					
1.700	0.85590E	00	0.76099E 01	0.73257E	00	0.51038E 02					
1.800	0.79083E	00	0.76695E 01	0.62542E	00	0.51972E 02					
1.900	0.72946E	00	0.77206E 01	0.53211E	00	0.52861E 02					
2.000	0.67196E	00	0.77642E 01	0.45152E	00	0.53700E 02					
2.100	0.61838E	00	0.78012E 01	0.38240E	00	0.54488E 02					
2.200	0.56870E	00	0.78325E 01	0.32342E	00	0.55224E 02					
2.300	0.52280E	00	0.78589E 01	0.27332E	00	0.55908E 02					
2.400	0.48052E	00	0.78812E 01	0.23090E	00	0.56542E 02					
2.500	0.44165E	00	0.78999E 01	0.19506E	00	0.57128E 02					
2.700	0.37335E	00	0.79287E 01	0.13939E	00	0.58166E 02					
2.900	0.31614E	00	0.79491E 01	0.99946E-01		0.59042E 02					
3.100	0.26834E	00	0.79634E 01	0.72009E-01		0.59778E 02					
3.300	0.22844E	00	0.79735E 01	0.52183E-01		0.60397E 02					
3.500	0.19509E	00	0.79807E 01	0.38061E-01		0.60916E 02					

F 1S(2)2S(2)2P(5) 2P

F			S		F**2		(N-F)**2
0.000	0.90000E 01	0.75817E-04	0.80999E 02	0.14371E-08			
0.025	0.89531E 01	0.61952E-01	0.80157E 02	0.22045E-02			
0.050	0.88150E 01	0.24185E 00	0.77705E 02	0.34223E-01			
0.075	0.85936E 01	0.52390E 00	0.73850E 02	0.16518E 00			
0.100	0.83005E 01	0.88561E 00	0.68898E 02	0.48932E 00			
0.125	0.79501E 01	0.13021E 01	0.63204E 02	0.11024E 01			
0.150	0.75577E 01	0.17500E 01	0.57119E 02	0.20803E 01			
0.175	0.71384E 01	0.22095E 01	0.50957E 02	0.34656E 01			
0.200	0.67060E 01	0.26657E 01	0.44971E 02	0.52623E 01			
0.225	0.62724E 01	0.31081E 01	0.39343E 02	0.74397E 01			
0.250	0.58472E 01	0.35296E 01	0.34189E 02	0.99404E 01			
0.275	0.54377E 01	0.39261E 01	0.29568E 02	0.12690E 02			
0.300	0.50492E 01	0.42953E 01	0.25495E 02	0.15609E 02			
0.325	0.46853E 01	0.46361E 01	0.21952E 02	0.18617E 02			
0.350	0.43478E 01	0.49484E 01	0.18904E 02	0.21643E 02			
0.375	0.40376E 01	0.52327E 01	0.16302E 02	0.24625E 02			
0.400	0.37545E 01	0.54903E 01	0.14097E 02	0.27515E 02			
0.425	0.34977E 01	0.57223E 01	0.12234E 02	0.30275E 02			
0.450	0.32660E 01	0.59307E 01	0.10667E 02	0.32879E 02			
0.475	0.30577E 01	0.61172E 01	0.93493E 01	0.35311E 02			
0.500	0.28711E 01	0.62838E 01	0.82432E 01	0.37564E 02			
0.550	0.25560E 01	0.65652E 01	0.65330E 01	0.41526E 02			
0.600	0.23065E 01	0.67901E 01	0.53198E 01	0.44803E 02			
0.650	0.21096E 01	0.69718E 01	0.44506E 01	0.47477E 02			
0.700	0.19543E 01	0.71214E 01	0.38191E 01	0.49643E 02			
0.750	0.18310E 01	0.72472E 01	0.33527E 01	0.51394E 02			
0.800	0.17323E 01	0.73559E 01	0.30010E 01	0.52819E 02			
0.850	0.16521E 01	0.74520E 01	0.27296E 01	0.53991E 02			
0.900	0.15857E 01	0.75391E 01	0.25144E 01	0.54972E 02			
0.950	0.15293E 01	0.76195E 01	0.23389E 01	0.55811E 02			
1.000	0.14803E 01	0.76948E 01	0.21912E 01	0.56546E 02			
1.100	0.13961E 01	0.78341E 01	0.19491E 01	0.57820E 02			
1.200	0.13221E 01	0.79618E 01	0.17480E 01	0.58950E 02			
1.300	0.12527E 01	0.80795E 01	0.15692E 01	0.60021E 02			
1.400	0.11852E 01	0.81879E 01	0.14046E 01	0.61072E 02			
1.500	0.11187E 01	0.82869E 01	0.12515E 01	0.62115E 02			
1.600	0.10532E 01	0.83766E 01	0.11092E 01	0.63152E 02			
1.700	0.98893E 00	0.84571E 01	0.97799E 00	0.64177E 02			
1.800	0.92641E 00	0.85288E 01	0.85824E 00	0.65183E 02			
1.900	0.86603E 00	0.85922E 01	0.75000E 00	0.66162E 02			
2.000	0.80813E 00	0.86479E 01	0.65308E 00	0.67107E 02			
2.100	0.75299E 00	0.86965E 01	0.56700E 00	0.68013E 02			
2.200	0.70077E 00	0.87389E 01	0.49108E 00	0.68877E 02			
2.300	0.65155E 00	0.87755E 01	0.42452E 00	0.69697E 02			
2.400	0.60536E 00	0.88072E 01	0.36646E 00	0.70470E 02			
2.500	0.56215E 00	0.88344E 01	0.31601E 00	0.71197E 02			
2.700	0.48437E 00	0.88780E 01	0.23461E 00	0.72516E 02			
2.900	0.41728E 00	0.89099E 01	0.17413E 00	0.73663E 02			
3.100	0.35975E 00	0.89334E 01	0.12942E 00	0.74654E 02			
3.300	0.31059E 00	0.89505E 01	0.96466E-01	0.75506E 02			
3.500	0.26865E 00	0.89631E 01	0.72173E-01	0.76237E 02			

NE 1S(2)2S(2)2P(6) 1S

F			S		F**2		(N-F)**2	
0.000	0.10000E	02	0.98825E-04	0.99999E	02	0.24475E-08		
0.025	0.99569E	01	0.55769E-01	0.99141E	02	0.18544E-02		
0.050	0.98299E	01	0.21852E 00	0.96628E	02	0.28920E-01		
0.075	0.95249E	01	0.47642E 00	0.92638E	02	0.14073E 00		
0.100	0.93508E	01	0.81206E 00	0.87437E	02	0.42151E 00		
0.125	0.90190E	01	0.12055E 01	0.81342E	02	0.96237E 00		
0.150	0.86421E	01	0.16370E 01	0.74686E	02	0.18440E 01		
0.175	0.82327E	01	0.20890E 01	0.67778E	02	0.31232E 01		
0.200	0.78031E	01	0.25472E 01	0.60889E	02	0.48263E 01		
0.225	0.73641E	01	0.30008E 01	0.54230E	02	0.69480E 01		
0.250	0.69251E	01	0.34422E 01	0.47957E	02	0.94552E 01		
0.275	0.64937E	01	0.38662E 01	0.42169E	02	0.12294E 02		
0.300	0.60761E	01	0.42693E 01	0.36919E	02	0.15397E 02		
0.325	0.56767E	01	0.46495E 01	0.32225E	02	0.18691E 02		
0.350	0.52986E	01	0.50057E 01	0.28075E	02	0.22103E 02		
0.375	0.49438E	01	0.53374E 01	0.24441E	02	0.25565E 02		
0.400	0.46133E	01	0.56445E 01	0.21283E	02	0.29016E 02		
0.425	0.43074E	01	0.59276E 01	0.18553E	02	0.32406E 02		
0.450	0.40257E	01	0.61873E 01	0.16206E	02	0.35693E 02		
0.475	0.37675E	01	0.64245E 01	0.14194E	02	0.38845E 02		
0.500	0.35317E	01	0.66404E 01	0.12473E	02	0.41839E 02		
0.550	0.31226E	01	0.70140E 01	0.97504E	01	0.47299E 02		
0.600	0.27871E	01	0.73197E 01	0.77679E	01	0.52026E 02		
0.650	0.25140E	01	0.75692E 01	0.63202E	01	0.56040E 02		
0.700	0.22926E	01	0.77737E 01	0.52562E	01	0.59403E 02		
0.750	0.21135E	01	0.79429E 01	0.44668E	01	0.62197E 02		
0.800	0.19683E	01	0.80848E 01	0.38744E	01	0.64508E 02		
0.850	0.18503E	01	0.82059E 01	0.34236E	01	0.66418E 02		
0.900	0.17536E	01	0.83113E 01	0.30751E	01	0.68003E 02		
0.950	0.16736E	01	0.84049E 01	0.28008E	01	0.69329E 02		
1.000	0.16064E	01	0.84896E 01	0.25807E	01	0.70452E 02		
1.100	0.14994E	01	0.86402E 01	0.22483E	01	0.72259E 02		
1.200	0.14153E	01	0.87739E 01	0.20032E	01	0.73697E 02		
1.300	0.13437E	01	0.88959E 01	0.18055E	01	0.74931E 02		
1.400	0.12786E	01	0.90087E 01	0.16348E	01	0.76063E 02		
1.500	0.12167E	01	0.91131E 01	0.14805E	01	0.77146E 02		
1.600	0.11566E	01	0.92095E 01	0.13377E	01	0.78206E 02		
1.700	0.10975E	01	0.92980E 01	0.12045E	01	0.79254E 02		
1.800	0.10394E	01	0.93787E 01	0.10804E	01	0.80292E 02		
1.900	0.98245E	00	0.94517E 01	0.96522E	00	0.81316E 02		
2.000	0.92689E	00	0.95175E 01	0.85912E	00	0.82321E 02		
2.100	0.87298E	00	0.95763E 01	0.76210E	00	0.83302E 02		
2.200	0.82100E	00	0.96287E 01	0.67403E	00	0.84254E 02		
2.300	0.77112E	00	0.96751E 01	0.59462E	00	0.85172E 02		
2.400	0.72349E	00	0.97161E 01	0.52344E	00	0.86054E 02		
2.500	0.67820E	00	0.97522E 01	0.45996E	00	0.86896E 02		
2.700	0.59479E	00	0.98115E 01	0.35378E	00	0.88458E 02		
2.900	0.52078E	00	0.98568E 01	0.27122E	00	0.89856E 02		
3.100	0.45568E	00	0.98911E 01	0.20765E	00	0.91094E 02		
3.300	0.39877E	00	0.99171E 01	0.15901E	00	0.92184E 02		
3.500	0.34920E	00	0.99368E 01	0.12194E	00	0.93138E 02		

NA K(2)L(8)3S(1) 2S

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.11000E	02	-0.30875E	-04		0.12100E	03		0.23648E	-09	
0.025	0.10880E	02	0.20912E	00		0.11837E	03		0.14479E	-01	
0.050	0.10567E	02	0.67370E	00		0.11166E	03		0.18744E	00	
0.075	0.10165E	02	0.11336E	01		0.10334E	03		0.69657E	00	
0.100	0.97586E	01	0.15029E	01		0.95231E	02		0.15410E	01	
0.125	0.93797E	01	0.18281E	01		0.87979E	02		0.26254E	01	
0.150	0.90253E	01	0.21602E	01		0.81455E	02		0.38996E	01	
0.175	0.86805E	01	0.25158E	01		0.75352E	02		0.53799E	01	
0.200	0.83335E	01	0.28913E	01		0.69448E	02		0.71100E	01	
0.225	0.79787E	01	0.32778E	01		0.63660E	02		0.91280E	01	
0.250	0.76158E	01	0.36672E	01		0.58000E	02		0.11453E	02	
0.275	0.72474E	01	0.40530E	01		0.52525E	02		0.14082E	02	
0.300	0.68778E	01	0.44306E	01		0.47303E	02		0.16993E	02	
0.325	0.65111E	01	0.47966E	01		0.42395E	02		0.20150E	02	
0.350	0.61516E	01	0.51487E	01		0.37842E	02		0.23507E	02	
0.375	0.58025E	01	0.54849E	01		0.33670E	02		0.27014E	02	
0.400	0.54668E	01	0.58043E	01		0.29885E	02		0.30617E	02	
0.425	0.51463E	01	0.61061E	01		0.26484E	02		0.34266E	02	
0.450	0.48425E	01	0.63898E	01		0.23450E	02		0.37915E	02	
0.475	0.45563E	01	0.66554E	01		0.20760E	02		0.41521E	02	
0.500	0.42882E	01	0.69031E	01		0.18389E	02		0.45048E	02	
0.550	0.38058E	01	0.73463E	01		0.14484E	02		0.51756E	02	
0.600	0.33925E	01	0.77243E	01		0.11509E	02		0.57874E	02	
0.650	0.30425E	01	0.80439E	01		0.92570E	01		0.63321E	02	
0.700	0.27489E	01	0.83126E	01		0.75562E	01		0.68081E	02	
0.750	0.25040E	01	0.85384E	01		0.62701E	01		0.72182E	02	
0.800	0.23008E	01	0.87286E	01		0.52935E	01		0.75677E	02	
0.850	0.21324E	01	0.88898E	01		0.45471E	01		0.78634E	02	
0.900	0.19930E	01	0.90276E	01		0.39719E	01		0.81127E	02	
0.950	0.18772E	01	0.91470E	01		0.35240E	01		0.83225E	02	
1.000	0.17808E	01	0.92519E	01		0.31712E	01		0.84994E	02	
1.100	0.16312E	01	0.94298E	01		0.26609E	01		0.87774E	02	
1.200	0.15213E	01	0.95792E	01		0.23144E	01		0.89845E	02	
1.300	0.14358E	01	0.97104E	01		0.20615E	01		0.91474E	02	
1.400	0.13648E	01	0.98292E	01		0.18626E	01		0.92838E	02	
1.500	0.13021E	01	0.99386E	01		0.16954E	01		0.94050E	02	
1.600	0.12441E	01	0.10040E	02		0.15477E	01		0.95178E	02	
1.700	0.11887E	01	0.10134E	02		0.14129E	01		0.96262E	02	
1.800	0.11348E	01	0.10221E	02		0.12877E	01		0.97323E	02	
1.900	0.10819E	01	0.10302E	02		0.11706E	01		0.98368E	02	
2.000	0.10300E	01	0.10376E	02		0.10609E	01		0.99401E	02	
2.100	0.97902E	00	0.10443E	02		0.95848E	00		0.10042E	03	
2.200	0.92918E	00	0.10504E	02		0.86337E	00		0.10142E	03	
2.300	0.88063E	00	0.10559E	02		0.77552E	00		0.10240E	03	
2.400	0.83357E	00	0.10609E	02		0.69483E	00		0.10336E	03	
2.500	0.78813E	00	0.10654E	02		0.62114E	00		0.10428E	03	
2.700	0.70258E	00	0.10729E	02		0.49362E	00		0.10604E	03	
2.900	0.62456E	00	0.10789E	02		0.39008E	00		0.10765E	03	
3.100	0.55420E	00	0.10835E	02		0.30714E	00		0.10911E	03	
3.300	0.49127E	00	0.10872E	02		0.24135E	00		0.11043E	03	
3.500	0.43534E	00	0.10900E	02		0.18952E	00		0.11161E	03	

MG K(2)L(8)3S(2) 1S

F		S		F**2		(N-F)**2	
0.000	0.12000E 02	-0.18489E-03	0.14400E 03	0.85354E-08			
0.025	0.11867E 02	0.24079E 00	0.14083E 03	0.17635E-01			
0.050	0.11506E 02	0.83079E 00	0.13239E 03	0.24379E 00			
0.075	0.11008E 02	0.15012E 01	0.12118E 03	0.98388E 00			
0.100	0.10469E 02	0.20658E 01	0.10961E 03	0.23424E 01			
0.125	0.99571E 01	0.24912E 01	0.99144E 02	0.41735E 01			
0.150	0.94989E 01	0.28286E 01	0.90228E 02	0.62557E 01			
0.175	0.90950E 01	0.31352E 01	0.82719E 02	0.84391E 01			
0.200	0.87323E 01	0.34436E 01	0.76259E 02	0.10676E 02			
0.225	0.83968E 01	0.37641E 01	0.70503E 02	0.12984E 02			
0.250	0.80745E 01	0.40956E 01	0.65198E 02	0.15409E 02			
0.275	0.77581E 01	0.44331E 01	0.60189E 02	0.17993E 02			
0.300	0.74431E 01	0.47714E 01	0.55399E 02	0.20766E 02			
0.325	0.71278E 01	0.51062E 01	0.50805E 02	0.23739E 02			
0.350	0.68127E 01	0.54346E 01	0.46413E 02	0.26908E 02			
0.375	0.64993E 01	0.57544E 01	0.42241E 02	0.30257E 02			
0.400	0.61896E 01	0.60639E 01	0.38311E 02	0.33760E 02			
0.425	0.58857E 01	0.63621E 01	0.34642E 02	0.37384E 02			
0.450	0.55896E 01	0.66481E 01	0.31244E 02	0.41093E 02			
0.475	0.53031E 01	0.69213E 01	0.28123E 02	0.44849E 02			
0.500	0.50275E 01	0.71812E 01	0.25275E 02	0.48616E 02			
0.550	0.45132E 01	0.76607E 01	0.20369E 02	0.56052E 02			
0.600	0.40520E 01	0.80862E 01	0.16419E 02	0.63171E 02			
0.650	0.36449E 01	0.84595E 01	0.13285E 02	0.69808E 02			
0.700	0.32902E 01	0.87839E 01	0.10825E 02	0.75861E 02			
0.750	0.29842E 01	0.90639E 01	0.89054E 01	0.81285E 02			
0.800	0.27224E 01	0.93045E 01	0.74113E 01	0.86074E 02			
0.850	0.24997E 01	0.95111E 01	0.62484E 01	0.90256E 02			
0.900	0.23111E 01	0.96887E 01	0.53410E 01	0.93875E 02			
0.950	0.21517E 01	0.98420E 01	0.46300E 01	0.96988E 02			
1.000	0.20173E 01	0.99753E 01	0.40694E 01	0.99655E 02			
1.100	0.18076E 01	0.10196E 02	0.32675E 01	0.10388E 03			
1.200	0.16560E 01	0.10372E 02	0.27423E 01	0.10700E 03			
1.300	0.15432E 01	0.10521E 02	0.23815E 01	0.10934E 03			
1.400	0.14558E 01	0.10650E 02	0.21193E 01	0.11118E 03			
1.500	0.13845E 01	0.10766E 02	0.19167E 01	0.11269E 03			
1.600	0.13231E 01	0.10873E 02	0.17505E 01	0.11400E 03			
1.700	0.12677E 01	0.10972E 02	0.16071E 01	0.11518E 03			
1.800	0.12159E 01	0.11064E 02	0.14783E 01	0.11630E 03			
1.900	0.11661E 01	0.11150E 02	0.13599E 01	0.11737E 03			
2.000	0.11177E 01	0.11229E 02	0.12492E 01	0.11842E 03			
2.100	0.10701E 01	0.11303E 02	0.11452E 01	0.11946E 03			
2.200	0.10234E 01	0.11371E 02	0.10473E 01	0.12049E 03			
2.300	0.97737E 00	0.11434E 02	0.95526E 00	0.12150E 03			
2.400	0.93227E 00	0.11491E 02	0.86913E 00	0.12249E 03			
2.500	0.88818E 00	0.11543E 02	0.78886E 00	0.12347E 03			
2.700	0.80354E 00	0.11633E 02	0.64567E 00	0.12536E 03			
2.900	0.72435E 00	0.11707E 02	0.52469E 00	0.12714E 03			
3.100	0.65121E 00	0.11757E 02	0.42407E 00	0.12880E 03			
3.300	0.58433E 00	0.11814E 02	0.34144E 00	0.13032E 03			
3.500	0.52369E 00	0.11852E 02	0.27425E 00	0.13171E 03			

AL K(2)L(8)3S(2)3P(1) 2P

F			S		F**2		(N-F)**2
0.000	0.13000E	02	0.47684E	-04	0.16900E	03	0.56843E-09
0.025	0.12849E	02	0.23460E	00	0.16511E	03	0.22662E-01
0.050	0.12438E	02	0.82361E	00	0.15470E	03	0.31604E 00
0.075	0.11862E	02	0.15396E	01	0.14070E	03	0.12961E 01
0.100	0.11226E	02	0.22171E	01	0.12602E	03	0.31471E 01
0.125	0.10610E	02	0.27948E	01	0.11257E	03	0.57129E 01
0.150	0.10054E	02	0.32723E	01	0.10109E	03	0.86764E 01
0.175	0.95711E	01	0.36713E	01	0.91606E	02	0.11757E 02
0.200	0.91536E	01	0.40185E	01	0.83788E	02	0.14795E 02
0.225	0.87682E	01	0.43371E	01	0.77233E	02	0.17739E 02
0.250	0.84603E	01	0.46430E	01	0.71577E	02	0.20609E 02
0.275	0.81570E	01	0.49452E	01	0.66536E	02	0.23455E 02
0.300	0.78684E	01	0.52468E	01	0.61912E	02	0.26333E 02
0.325	0.75878E	01	0.55481E	01	0.57575E	02	0.29292E 02
0.350	0.73109E	01	0.58477E	01	0.53450E	02	0.32365E 02
0.375	0.70356E	01	0.61439E	01	0.49499E	02	0.35574E 02
0.400	0.67611E	01	0.64349E	01	0.45713E	02	0.38924E 02
0.425	0.64878E	01	0.67194E	01	0.42092E	02	0.42409E 02
0.450	0.62166E	01	0.69963E	01	0.38646E	02	0.46014E 02
0.475	0.59488E	01	0.72645E	01	0.35388E	02	0.49720E 02
0.500	0.56856E	01	0.75236E	01	0.32326E	02	0.53500E 02
0.550	0.51786E	01	0.80120E	01	0.26818E	02	0.61174E 02
0.600	0.47044E	01	0.84588E	01	0.22131E	02	0.68817E 02
0.650	0.42688E	01	0.88631E	01	0.18222E	02	0.76234E 02
0.700	0.38748E	01	0.92252E	01	0.15014E	02	0.83269E 02
0.750	0.35231E	01	0.95467E	01	0.12412E	02	0.89811E 02
0.800	0.32125E	01	0.98302E	01	0.10320E	02	0.95795E 02
0.850	0.29405E	01	0.10079E	02	0.86466E	01	0.10119E 03
0.900	0.27040E	01	0.10296E	02	0.73118E	01	0.10601E 03
0.950	0.24996E	01	0.10486E	02	0.62478E	01	0.11026E 03
1.000	0.23235E	01	0.10652E	02	0.53985E	01	0.11399E 03
1.100	0.20426E	01	0.10926E	02	0.41720E	01	0.12007E 03
1.200	0.18359E	01	0.11141E	02	0.33705E	01	0.12464E 03
1.300	0.16827E	01	0.11316E	02	0.28316E	01	0.12808E 03
1.400	0.15671E	01	0.11464E	02	0.24557E	01	0.13071E 03
1.500	0.14772E	01	0.11592E	02	0.21820E	01	0.13278E 03
1.600	0.14044E	01	0.11707E	02	0.19725E	01	0.13446E 03
1.700	0.13430E	01	0.11811E	02	0.18037E	01	0.13588E 03
1.800	0.12888E	01	0.11908E	02	0.16611E	01	0.13715E 03
1.900	0.12392E	01	0.11998E	02	0.15356E	01	0.13832E 03
2.000	0.11924E	01	0.12083E	02	0.14217E	01	0.13942E 03
2.100	0.11473E	01	0.12161E	02	0.13162E	01	0.14049E 03
2.200	0.11033E	01	0.12235E	02	0.12172E	01	0.14153E 03
2.300	0.10601E	01	0.12303E	02	0.11238E	01	0.14256E 03
2.400	0.10176E	01	0.12366E	02	0.10354E	01	0.14358E 03
2.500	0.97570E	00	0.12425E	02	0.95193E	00	0.14458E 03
2.700	0.89418E	00	0.12528E	02	0.79956E	00	0.14655E 03
2.900	0.81627E	00	0.12615E	02	0.66630E	00	0.14844E 03
3.100	0.74272E	00	0.12687E	02	0.55163E	00	0.15024E 03
3.300	0.67405E	00	0.12746E	02	0.45434E	00	0.15193E 03
3.500	0.61056E	00	0.12794E	02	0.37279E	00	0.15350E 03

SI K(2)L(8)3S(2)3P(2) 3P

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.14000E 02	0.14663E-04	0.19600E 03	0.54627E-10
0.025	0.13854E 02	0.20995E 00	0.19193E 03	0.21323E-01
0.050	0.13445E 02	0.76243E 00	0.18076E 03	0.30814E 00
0.075	0.12847E 02	0.14861E 01	0.16506E 03	0.13285E 01
0.100	0.12154E 02	0.22266E 01	0.14771E 03	0.34093E 01
0.125	0.11445E 02	0.29024E 01	0.13100E 03	0.65262E 01
0.150	0.10780E 02	0.34916E 01	0.11620E 03	0.10371E 02
0.175	0.10185E 02	0.39996E 01	0.10374E 03	0.14550E 02
0.200	0.96709E 01	0.44395E 01	0.93526E 02	0.18741E 02
0.225	0.92301E 01	0.48253E 01	0.85194E 02	0.22752E 02
0.250	0.88508E 01	0.51708E 01	0.78337E 02	0.26514E 02
0.275	0.85191E 01	0.54881E 01	0.72576E 02	0.30040E 02
0.300	0.82220E 01	0.57871E 01	0.67602E 02	0.33385E 02
0.325	0.79485E 01	0.60745E 01	0.63178E 02	0.36621E 02
0.350	0.76900E 01	0.63547E 01	0.59137E 02	0.39815E 02
0.375	0.74406E 01	0.66298E 01	0.55362E 02	0.43026E 02
0.400	0.71959E 01	0.69006E 01	0.51781E 02	0.46295E 02
0.425	0.69537E 01	0.71673E 01	0.48354E 02	0.49650E 02
0.450	0.67127E 01	0.74291E 01	0.45060E 02	0.53105E 02
0.475	0.64725E 01	0.76857E 01	0.41893E 02	0.56663E 02
0.500	0.62334E 01	0.79362E 01	0.38656E 02	0.60319E 02
0.550	0.57616E 01	0.84168E 01	0.33196E 02	0.67871E 02
0.600	0.53043E 01	0.88669E 01	0.28135E 02	0.75615E 02
0.650	0.48687E 01	0.92842E 01	0.23704E 02	0.83381E 02
0.700	0.44606E 01	0.96671E 01	0.19897E 02	0.91001E 02
0.750	0.40836E 01	0.10016E 02	0.16678E 02	0.98330E 02
0.800	0.37405E 01	0.10330E 02	0.13991E 02	0.10526E 03
0.850	0.34309E 01	0.10612E 02	0.11771E 02	0.11171E 03
0.900	0.31543E 01	0.10864E 02	0.99494E 01	0.11753E 03
0.950	0.29090E 01	0.11088E 02	0.84623E 01	0.12301E 03
1.000	0.26929E 01	0.11286E 02	0.72515E 01	0.12785E 03
1.100	0.23376E 01	0.11617E 02	0.54653E 01	0.13601E 03
1.200	0.20683E 01	0.11879E 02	0.42778E 01	0.14237E 03
1.300	0.18648E 01	0.12089E 02	0.34774E 01	0.14726E 03
1.400	0.17106E 01	0.12262E 02	0.29262E 01	0.15103E 03
1.500	0.15925E 01	0.12408E 02	0.25359E 01	0.15395E 03
1.600	0.15000E 01	0.12535E 02	0.22499E 01	0.15625E 03
1.700	0.14254E 01	0.12649E 02	0.20317E 01	0.15812E 03
1.800	0.13631E 01	0.12752E 02	0.18581E 01	0.15969E 03
1.900	0.13091E 01	0.12848E 02	0.17137E 01	0.16106E 03
2.000	0.12605E 01	0.12937E 02	0.15889E 01	0.16229E 03
2.100	0.12155E 01	0.13020E 02	0.14773E 01	0.16344E 03
2.200	0.11727E 01	0.13097E 02	0.13751E 01	0.16454E 03
2.300	0.11313E 01	0.13170E 02	0.12799E 01	0.16560E 03
2.400	0.10910E 01	0.13239E 02	0.11903E 01	0.16664E 03
2.500	0.10514E 01	0.13302E 02	0.11054E 01	0.16767E 03
2.700	0.97387E 00	0.13416E 02	0.94843E 00	0.16968E 03
2.900	0.89883E 00	0.13515E 02	0.80790E 00	0.17164E 03
3.100	0.82674E 00	0.13598E 02	0.68351E 00	0.17353E 03
3.300	0.75820E 00	0.13668E 02	0.57487E 00	0.17534E 03
3.500	0.69368E 00	0.13726E 02	0.48119E 00	0.17706E 03

P K(2)L(8)3S(2)3P(3) 4S

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.15000E	02	0.17393E	-03		0.22500E	03		0.75730E	-08	
0.025	0.14862E	02	0.18703E	00		0.22089E	03		0.18960E	-01	
0.050	0.14470E	02	0.69490E	00		0.20939E	03		0.28045E	00	
0.075	0.13880E	02	0.13980E	01		0.19266E	03		0.12536E	01	
0.100	0.13167E	02	0.21645E	01		0.17337E	03		0.33604E	01	
0.125	0.12405E	02	0.29044E	01		0.15387E	03		0.67364E	01	
0.150	0.11654E	02	0.35778E	01		0.13582E	03		0.11193E	02	
0.175	0.10957E	02	0.41766E	01		0.12007E	03		0.16342E	02	
0.200	0.10335E	02	0.47063E	01		0.10682E	03		0.21759E	02	
0.225	0.97940E	01	0.51750E	01		0.95923E	02		0.27102E	02	
0.250	0.93293E	01	0.55912E	01		0.87036E	02		0.32157E	02	
0.275	0.89313E	01	0.59632E	01		0.79768E	02		0.36829E	02	
0.300	0.85878E	01	0.62995E	01		0.73750E	02		0.41117E	02	
0.325	0.82865E	01	0.66080E	01		0.68667E	02		0.45071E	02	
0.350	0.80166E	01	0.68959E	01		0.64266E	02		0.48768E	02	
0.375	0.77688E	01	0.71690E	01		0.60355E	02		0.52290E	02	
0.400	0.75359E	01	0.74314E	01		0.56790E	02		0.55712E	02	
0.425	0.73125E	01	0.76862E	01		0.53472E	02		0.59098E	02	
0.450	0.70946E	01	0.79349E	01		0.50333E	02		0.62496E	02	
0.475	0.68797E	01	0.81785E	01		0.47330E	02		0.65939E	02	
0.500	0.66664E	01	0.84173E	01		0.44440E	02		0.69449E	02	
0.550	0.62419E	01	0.88804E	01		0.38961E	02		0.76704E	02	
0.600	0.58212E	01	0.93219E	01		0.33886E	02		0.84250E	02	
0.650	0.54086E	01	0.97392E	01		0.29253E	02		0.91995E	02	
0.700	0.50097E	01	0.10130E	02		0.25097E	02		0.99807E	02	
0.750	0.46296E	01	0.10493E	02		0.21433E	02		0.10754E	03	
0.800	0.42726E	01	0.10827E	02		0.18255E	02		0.11508E	03	
0.850	0.39413E	01	0.11132E	02		0.15533E	02		0.12230E	03	
0.900	0.36371E	01	0.11410E	02		0.13228E	02		0.12912E	03	
0.950	0.33604E	01	0.11662E	02		0.11292E	02		0.13548E	03	
1.000	0.31108E	01	0.11888E	02		0.96769E	01		0.14135E	03	
1.100	0.26876E	01	0.12274E	02		0.72230E	01		0.15160E	03	
1.200	0.23542E	01	0.12584E	02		0.55421E	01		0.15992E	03	
1.300	0.20949E	01	0.12834E	02		0.43888E	01		0.16654E	03	
1.400	0.18946E	01	0.13038E	02		0.35897E	01		0.17175E	03	
1.500	0.17398E	01	0.13209E	02		0.30270E	01		0.17583E	03	
1.600	0.16193E	01	0.13354E	02		0.26220E	01		0.17904E	03	
1.700	0.15240E	01	0.13480E	02		0.23226E	01		0.18160E	03	
1.800	0.14471E	01	0.13593E	02		0.20941E	01		0.18368E	03	
1.900	0.13833E	01	0.13696E	02		0.19134E	01		0.18542E	03	
2.000	0.13286E	01	0.13790E	02		0.17651E	01		0.18691E	03	
2.100	0.12802E	01	0.13876E	02		0.16389E	01		0.18823E	03	
2.200	0.12361E	01	0.13960E	02		0.15279E	01		0.18945E	03	
2.300	0.11948E	01	0.14037E	02		0.14276E	01		0.19058E	03	
2.400	0.11555E	01	0.14109E	02		0.13351E	01		0.19167E	03	
2.500	0.11174E	01	0.14177E	02		0.12485E	01		0.19273E	03	
2.700	0.10436E	01	0.14301E	02		0.10891E	01		0.19478E	03	
2.900	0.97209E	00	0.14408E	02		0.94497E	00		0.19678E	03	
3.100	0.90266E	00	0.14502E	02		0.81479E	00		0.19874E	03	
3.300	0.83566E	00	0.14582E	02		0.69834E	00		0.20063E	03	
3.500	0.77158E	00	0.14650E	02		0.59534E	00		0.20245E	03	

S K(2)L(8)3S(2)3P(4) 3P

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.16000E	02	0.19622E-03	0.25600E	03	0.96488E-08					
0.025	0.15867E	02	0.17546E 00	0.25176E	03	0.17581E-01					
0.050	0.15485E	02	0.65918E 00	0.23980E	03	0.26473E 00					
0.075	0.14902E	02	0.13475E 01	0.22206E	03	0.12051E 01					
0.100	0.14180E	02	0.21242E 01	0.20107E	03	0.33126E 01					
0.125	0.13388E	02	0.29009E 01	0.17923E	03	0.68251E 01					
0.150	0.12584E	02	0.36302E 01	0.15835E	03	0.11671E 02					
0.175	0.11813E	02	0.42959E 01	0.13955E	03	0.17528E 02					
0.200	0.11105E	02	0.48974E 01	0.12331E	03	0.23954E 02					
0.225	0.10472E	02	0.54391E 01	0.10967E	03	0.30558E 02					
0.250	0.99188E	01	0.59256E 01	0.98382E	02	0.36981E 02					
0.275	0.94406E	01	0.63616E 01	0.89125E	02	0.43026E 02					
0.300	0.90292E	01	0.67524E 01	0.81527E	02	0.48592E 02					
0.325	0.86743E	01	0.71040E 01	0.75243E	02	0.53666E 02					
0.350	0.83652E	01	0.74229E 01	0.69976E	02	0.58290E 02					
0.375	0.80920E	01	0.77156E 01	0.65480E	02	0.62536E 02					
0.400	0.78459E	01	0.79880E 01	0.61559E	02	0.66489E 02					
0.425	0.76197E	01	0.82449E 01	0.58060E	02	0.70230E 02					
0.450	0.74074E	01	0.84904E 01	0.54869E	02	0.73833E 02					
0.475	0.72044E	01	0.87273E 01	0.51904E	02	0.77362E 02					
0.500	0.70075E	01	0.89575E 01	0.49106E	02	0.80864E 02					
0.550	0.66230E	01	0.94022E 01	0.43664E	02	0.87928E 02					
0.600	0.62433E	01	0.98288E 01	0.38978E	02	0.95193E 02					
0.650	0.58660E	01	0.10237E 02	0.34410E	02	0.10270E 03					
0.700	0.54932E	01	0.10626E 02	0.30175E	02	0.11039E 03					
0.750	0.51285E	01	0.10992E 02	0.26302E	02	0.11819E 03					
0.800	0.47764E	01	0.11336E 02	0.22814E	02	0.12597E 03					
0.850	0.44406E	01	0.11656E 02	0.19719E	02	0.13362E 03					
0.900	0.41240E	01	0.11952E 02	0.17007E	02	0.14104E 03					
0.950	0.38287E	01	0.12224E 02	0.14659E	02	0.14814E 03					
1.000	0.35558E	01	0.12472E 02	0.12644E	02	0.15486E 03					
1.100	0.30779E	01	0.12905E 02	0.94736E	01	0.16698E 03					
1.200	0.26864E	01	0.13261E 02	0.72166E	01	0.17725E 03					
1.300	0.23716E	01	0.13552E 02	0.56244E	01	0.18573E 03					
1.400	0.21217E	01	0.13791E 02	0.45014E	01	0.19261E 03					
1.500	0.19246E	01	0.13990E 02	0.37042E	01	0.19812E 03					
1.600	0.17695E	01	0.14157E 02	0.31313E	01	0.20251E 03					
1.700	0.16470E	01	0.14301E 02	0.27126E	01	0.20601E 03					
1.800	0.15492E	01	0.14427E 02	0.23999E	01	0.20883E 03					
1.900	0.14698E	01	0.14539E 02	0.21604E	01	0.21113E 03					
2.000	0.14041E	01	0.14641E 02	0.19716E	01	0.21304E 03					
2.100	0.13483E	01	0.14735E 02	0.18178E	01	0.21467E 03					
2.200	0.12995E	01	0.14822E 02	0.16886E	01	0.21611E 03					
2.300	0.12550E	01	0.14903E 02	0.15765E	01	0.21740E 03					
2.400	0.12152E	01	0.14979E 02	0.14767E	01	0.21859E 03					
2.500	0.11771E	01	0.15051E 02	0.13856E	01	0.21972E 03					
2.700	0.11054E	01	0.15182E 02	0.12218E	01	0.22185E 03					
2.900	0.10369E	01	0.15298E 02	0.10751E	01	0.22389E 03					
3.100	0.97044E	00	0.15401E 02	0.94175E	00	0.22589E 03					
3.300	0.90582E	00	0.15490E 02	0.82052E	00	0.22783E 03					
3.500	0.84326E	00	0.15567E 02	0.71111E	00	0.22973E 03					

CL K(2)L(8)3S(2)3P(5) 2P

F			S		F**2		(N-F)**2	
0.000	0.17000E	02	-0.24891E-03	0.28900E	03	0.15489E-07		
0.025	0.16874E	02	0.16168E	00	0.28473E	03	0.15874E-01	
0.050	0.16509E	02	0.61502E	00	0.27255E	03	0.24091E	00
0.075	0.15943E	02	0.12770E	01	0.25418E	03	0.11171E	01
0.100	0.15229E	02	0.20486E	01	0.23192E	03	0.31369E	01
0.125	0.14425E	02	0.28462E	01	0.20809E	03	0.66284E	01
0.150	0.13588E	02	0.36170E	01	0.18463E	03	0.11642E	02
0.175	0.12762E	02	0.43365E	01	0.16287E	03	0.17962E	02
0.200	0.11980E	02	0.49984E	01	0.14352E	03	0.25200E	02
0.225	0.11263E	02	0.56038E	01	0.12686E	03	0.32911E	02
0.250	0.10621E	02	0.61556E	01	0.11281E	03	0.40689E	02
0.275	0.10056E	02	0.66568E	01	0.10112E	03	0.48219E	02
0.300	0.95641E	01	0.71093E	01	0.91472E	02	0.55293E	02
0.325	0.91384E	01	0.75181E	01	0.83510E	02	0.61805E	02
0.350	0.87702E	01	0.78859E	01	0.76916E	02	0.67730E	02
0.375	0.84503E	01	0.82181E	01	0.71408E	02	0.73098E	02
0.400	0.81698E	01	0.85204E	01	0.66746E	02	0.77973E	02
0.425	0.79205E	01	0.87980E	01	0.62735E	02	0.82437E	02
0.450	0.76953E	01	0.90561E	01	0.59218E	02	0.86577E	02
0.475	0.74882E	01	0.92989E	01	0.56073E	02	0.90475E	02
0.500	0.72942E	01	0.95300E	01	0.53205E	02	0.94203E	02
0.550	0.69307E	01	0.99670E	01	0.48034E	02	0.10139E	03
0.600	0.65835E	01	0.10381E	02	0.43342E	02	0.10850E	03
0.650	0.62419E	01	0.10777E	02	0.38961E	02	0.11574E	03
0.700	0.59020E	01	0.11158E	02	0.34834E	02	0.12317E	03
0.750	0.55641E	01	0.11521E	02	0.30959E	02	0.13078E	03
0.800	0.52307E	01	0.11867E	02	0.27361E	02	0.13852E	03
0.850	0.49051E	01	0.12193E	02	0.24060E	02	0.14629E	03
0.900	0.45906E	01	0.12499E	02	0.21074E	02	0.15399E	03
0.950	0.42902E	01	0.12785E	02	0.18405E	02	0.16154E	03
1.000	0.40060E	01	0.13050E	02	0.16048E	02	0.16885E	03
1.100	0.34920E	01	0.13520E	02	0.12194E	02	0.18247E	03
1.200	0.30538E	01	0.13915E	02	0.93258E	01	0.19450E	03
1.300	0.26890E	01	0.14245E	02	0.72306E	01	0.20481E	03
1.400	0.23904E	01	0.14520E	02	0.57141E	01	0.21344E	03
1.500	0.21491E	01	0.14750E	02	0.46185E	01	0.22055E	03
1.600	0.19554E	01	0.14943E	02	0.38235E	01	0.22634E	03
1.700	0.18004E	01	0.15108E	02	0.32413E	01	0.23103E	03
1.800	0.16761E	01	0.15250E	02	0.28093E	01	0.23482E	03
1.900	0.15758E	01	0.15375E	02	0.24832E	01	0.23791E	03
2.000	0.14939E	01	0.15487E	02	0.22318E	01	0.24044E	03
2.100	0.14260E	01	0.15588E	02	0.20335E	01	0.24255E	03
2.200	0.13685E	01	0.15681E	02	0.18727E	01	0.24434E	03
2.300	0.13186E	01	0.15768E	02	0.17388E	01	0.24591E	03
2.400	0.12743E	01	0.15848E	02	0.16240E	01	0.24730E	03
2.500	0.12341E	01	0.15924E	02	0.15230E	01	0.24856E	03
2.700	0.11613E	01	0.16063E	02	0.13487E	01	0.25086E	03
2.900	0.10944E	01	0.16186E	02	0.11977E	01	0.25299E	03
3.100	0.10305E	01	0.16296E	02	0.10620E	01	0.25502E	03
3.300	0.96854E	00	0.16393E	02	0.93807E	00	0.25701E	03
3.500	0.90820E	00	0.16479E	02	0.82483E	00	0.25895E	03

A K(2)L(8)3S(2)3P(6) 1S

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.18000E	02	0.25201E-03	0.32400E	03	0.15907E-07					
0.025	0.17881E	02	0.14937E 00	0.31973E	03	0.14189E-01					
0.050	0.17535E	02	0.57165E 00	0.30746E	03	0.21660E 00					
0.075	0.16991E	02	0.12016E 01	0.28870E	03	0.10180E 01					
0.100	0.16294E	02	0.19564E 01	0.26549E	03	0.29106E 01					
0.125	0.15494E	02	0.27603E 01	0.24005E	03	0.62822E 01					
0.150	0.14640E	02	0.35585E 01	0.21432E	03	0.11292E 02					
0.175	0.13776E	02	0.43203E 01	0.18978E	03	0.17841E 02					
0.200	0.12938E	02	0.50328E 01	0.16739E	03	0.25624E 02					
0.225	0.12150E	02	0.56935E 01	0.14762E	03	0.34224E 02					
0.250	0.11427E	02	0.63034E 01	0.13058E	03	0.43200E 02					
0.275	0.10778E	02	0.68643E 01	0.11616E	03	0.52162E 02					
0.300	0.10202E	02	0.73777E 01	0.10408E	03	0.60807E 02					
0.325	0.96975E	01	0.78452E 01	0.94042E	02	0.68931E 02					
0.350	0.92579E	01	0.82688E 01	0.85710E	02	0.76423E 02					
0.375	0.88761E	01	0.86517E 01	0.78784E	02	0.83246E 02					
0.400	0.85439E	01	0.89978E 01	0.72998E	02	0.89418E 02					
0.425	0.82535E	01	0.93116E 01	0.68120E	02	0.94995E 02					
0.450	0.79974E	01	0.95980E 01	0.63959E	02	0.10005E 03					
0.475	0.77689E	01	0.98615E 01	0.60355E	02	0.10453E 03					
0.500	0.75621E	01	0.10107E 02	0.57185E	02	0.10895E 03					
0.550	0.71938E	01	0.10555E 02	0.51751E	02	0.11677E 03					
0.600	0.68619E	01	0.10967E 02	0.47086E	02	0.12406E 03					
0.650	0.65469E	01	0.11355E 02	0.42862E	02	0.13117E 03					
0.700	0.62379E	01	0.11726E 02	0.38912E	02	0.13835E 03					
0.750	0.59303E	01	0.12032E 02	0.35169E	02	0.14568E 03					
0.800	0.56233E	01	0.12424E 02	0.31621E	02	0.15318E 03					
0.850	0.53182E	01	0.12751E 02	0.28283E	02	0.16083E 03					
0.900	0.50176E	01	0.13061E 02	0.25176E	02	0.16854E 03					
0.950	0.47241E	01	0.13354E 02	0.22318E	02	0.17625E 03					
1.000	0.44406E	01	0.13630E 02	0.19719E	02	0.18386E 03					
1.100	0.39115E	01	0.14127E 02	0.15300E	02	0.19849E 03					
1.200	0.34422E	01	0.14556E 02	0.11849E	02	0.21193E 03					
1.300	0.30372E	01	0.14920E 02	0.92248E	01	0.22388E 03					
1.400	0.26950E	01	0.15229E 02	0.72633E	01	0.23424E 03					
1.500	0.24106E	01	0.15489E 02	0.58110E	01	0.24303E 03					
1.600	0.21769E	01	0.15710E 02	0.47389E	01	0.25037E 03					
1.700	0.19864E	01	0.15897E 02	0.39457E	01	0.25544E 03					
1.800	0.18316E	01	0.16059E 02	0.33548E	01	0.26142E 03					
1.900	0.17059E	01	0.16200E 02	0.29101E	01	0.26550E 03					
2.000	0.16034E	01	0.16324E 02	0.25708E	01	0.26885E 03					
2.100	0.15190E	01	0.16435E 02	0.23075E	01	0.27162E 03					
2.200	0.14488E	01	0.16536E 02	0.20990E	01	0.27394E 03					
2.300	0.13894E	01	0.16629E 02	0.19304E	01	0.27591E 03					
2.400	0.13381E	01	0.16715E 02	0.17906E	01	0.27762E 03					
2.500	0.12930E	01	0.16795E 02	0.16719E	01	0.27912E 03					
2.700	0.12152E	01	0.16941E 02	0.14767E	01	0.28173E 03					
2.900	0.11473E	01	0.17072E 02	0.13162E	01	0.28401E 03					
3.100	0.10845E	01	0.17189E 02	0.11762E	01	0.28613E 03					
3.300	0.10247E	01	0.17293E 02	0.10500E	01	0.28816E 03					
3.500	0.96660E	00	0.17386E 02	0.93432E	00	0.29014E 03					

K K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(1) 2S

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.19000E	02	0.34690E	-03		0.36099E	03		0.30209E	-07	
0.025	0.18774E	02	0.35889E	00		0.35247E	03		0.50971E	-01	
0.050	0.18200E	02	0.11062E	01		0.33124E	03		0.63994E	00	
0.075	0.17475E	02	0.18311E	01		0.30537E	03		0.23259E	01	
0.100	0.16727E	02	0.25005E	01		0.27978E	03		0.51685E	01	
0.125	0.15984E	02	0.31901E	01		0.25547E	03		0.70989E	01	
0.150	0.15235E	02	0.39053E	01		0.23212E	03		0.14172E	02	
0.175	0.14477E	02	0.46168E	01		0.20958E	03		0.20458E	02	
0.200	0.13717E	02	0.53012E	01		0.18815E	03		0.27913E	02	
0.225	0.12970E	02	0.59482E	01		0.16823E	03		0.36356E	02	
0.250	0.12254E	02	0.65550E	01		0.15017E	03		0.45505E	02	
0.275	0.11582E	02	0.71224E	01		0.13413E	03		0.55034E	02	
0.300	0.10961E	02	0.76516E	01		0.12014E	03		0.64625E	02	
0.325	0.10397E	02	0.81436E	01		0.10811E	03		0.74005E	02	
0.350	0.98915E	01	0.85990E	01		0.97843E	02		0.82964E	02	
0.375	0.94417E	01	0.90187E	01		0.89146E	02		0.91360E	02	
0.400	0.90442E	01	0.94040E	01		0.81798E	02		0.99117E	02	
0.425	0.86941E	01	0.97569E	01		0.75587E	02		0.10621E	03	
0.450	0.83856E	01	0.10080E	02		0.70319E	02		0.11267E	03	
0.475	0.81132E	01	0.10376E	02		0.65824E	02		0.11852E	03	
0.500	0.78711E	01	0.10649E	02		0.61954E	02		0.12385E	03	
0.550	0.74574E	01	0.11137E	02		0.55613E	02		0.13323E	03	
0.600	0.71087E	01	0.11568E	02		0.50533E	02		0.14140E	03	
0.650	0.67981E	01	0.11962E	02		0.46214E	02		0.14889E	03	
0.700	0.65073E	01	0.12329E	02		0.42345E	02		0.15607E	03	
0.750	0.62251E	01	0.12679E	02		0.38752E	02		0.16320E	03	
0.800	0.59456E	01	0.13014E	02		0.35350E	02		0.17042E	03	
0.850	0.56664E	01	0.13336E	02		0.32108E	02		0.17778E	03	
0.900	0.53878E	01	0.13645E	02		0.29028E	02		0.18529E	03	
0.950	0.51111E	01	0.13940E	02		0.26124E	02		0.19290E	03	
1.000	0.48386E	01	0.14220E	02		0.23412E	02		0.20055E	03	
1.100	0.43149E	01	0.14735E	02		0.18618E	02		0.21565E	03	
1.200	0.38322E	01	0.15189E	02		0.14686E	02		0.23006E	03	
1.300	0.34005E	01	0.15583E	02		0.11563E	02		0.24335E	03	
1.400	0.30238E	01	0.15922E	02		0.91432E	01		0.25524E	03	
1.500	0.27014E	01	0.16212E	02		0.72978E	01		0.26564E	03	
1.600	0.24298E	01	0.16460E	02		0.59037E	01		0.27457E	03	
1.700	0.22033E	01	0.16672E	02		0.48547E	01		0.28213E	03	
1.800	0.20161E	01	0.16855E	02		0.40646E	01		0.28845E	03	
1.900	0.18619E	01	0.17013E	02		0.34667E	01		0.29371E	03	
2.000	0.17351E	01	0.17152E	02		0.30107E	01		0.29808E	03	
2.100	0.16306E	01	0.17276E	02		0.26590E	01		0.30169E	03	
2.200	0.15441E	01	0.17386E	02		0.23841E	01		0.30471E	03	
2.300	0.14716E	01	0.17487E	02		0.21657E	01		0.30724E	03	
2.400	0.14103E	01	0.17579E	02		0.19890E	01		0.30940E	03	
2.500	0.13576E	01	0.17665E	02		0.18432E	01		0.31125E	03	
2.700	0.12704E	01	0.17819E	02		0.16140E	01		0.31434E	03	
2.900	0.11985E	01	0.17956E	02		0.14365E	01		0.31689E	03	
3.100	0.11351E	01	0.18080E	02		0.12885E	01		0.31915E	03	
3.300	0.10763E	01	0.18190E	02		0.11585E	01		0.32126E	03	
3.500	0.10201E	01	0.18290E	02		0.10406E	01		0.32328E	03	

CA K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2) 1S

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.20000E 02	0.22173E-04	0.40000E 03	0.12557E-09
0.025	0.19748E 02	0.42324E 00	0.38999E 03	0.63403E-01
0.050	0.19086E 02	0.13758E 01	0.36428E 03	0.83536E 00
0.075	0.18217E 02	0.23350E 01	0.33188E 03	0.31773E 01
0.100	0.17321E 02	0.31050E 01	0.30002E 03	0.71765E 01
0.125	0.16483E 02	0.37619E 01	0.27168E 03	0.12372E 02
0.150	0.15712E 02	0.44009E 01	0.24688E 03	0.18383E 02
0.175	0.14990E 02	0.50479E 01	0.22469E 03	0.25104E 02
0.200	0.14293E 02	0.56900E 01	0.20429E 03	0.32571E 02
0.225	0.13612E 02	0.63102E 01	0.18529E 03	0.40806E 02
0.250	0.12947E 02	0.68996E 01	0.16762E 03	0.49747E 02
0.275	0.12303E 02	0.74561E 01	0.15136E 03	0.59246E 02
0.300	0.11688E 02	0.79810E 01	0.13661E 03	0.69092E 02
0.325	0.11109E 02	0.84760E 01	0.12341E 03	0.79053E 02
0.350	0.10571E 02	0.89423E 01	0.11175E 03	0.88903E 02
0.375	0.10078E 02	0.93804E 01	0.10156E 03	0.98448E 02
0.400	0.96299E 01	0.97902E 01	0.92736E 02	0.10754E 03
0.425	0.92264E 01	0.10172E 02	0.85127E 02	0.11607E 03
0.450	0.88651E 01	0.10526E 02	0.78590E 02	0.12399E 03
0.475	0.85426E 01	0.10854E 02	0.72977E 02	0.13127E 03
0.500	0.82552E 01	0.11157E 02	0.68148E 02	0.13794E 03
0.550	0.77687E 01	0.11696E 02	0.60353E 02	0.14950E 03
0.600	0.73730E 01	0.12163E 02	0.54361E 02	0.15944E 03
0.650	0.70390E 01	0.12577E 02	0.49548E 02	0.16799E 03
0.700	0.67440E 01	0.12953E 02	0.45482E 02	0.17572E 03
0.750	0.64714E 01	0.13304E 02	0.41878E 02	0.18302E 03
0.800	0.62099E 01	0.13635E 02	0.38563E 02	0.19017E 03
0.850	0.59530E 01	0.13952E 02	0.35439E 02	0.19732E 03
0.900	0.56975E 01	0.14257E 02	0.32461E 02	0.20456E 03
0.950	0.54422E 01	0.14549E 02	0.29617E 02	0.21193E 03
1.000	0.51876E 01	0.14830E 02	0.26912E 02	0.21941E 03
1.100	0.46867E 01	0.15353E 02	0.21965E 02	0.23450E 03
1.200	0.42085E 01	0.15823E 02	0.17711E 02	0.24937E 03
1.300	0.37655E 01	0.16239E 02	0.14179E 02	0.26356E 03
1.400	0.33661E 01	0.16604E 02	0.11330E 02	0.27669E 03
1.500	0.30139E 01	0.16921E 02	0.90837E 01	0.28853E 03
1.600	0.27090E 01	0.17196E 02	0.73389E 01	0.29898E 03
1.700	0.24488E 01	0.17432E 02	0.59967E 01	0.30804E 03
1.800	0.22291E 01	0.17637E 02	0.49691E 01	0.31580E 03
1.900	0.20451E 01	0.17815E 02	0.41826E 01	0.32238E 03
2.000	0.18918E 01	0.17970E 02	0.35788E 01	0.32791E 03
2.100	0.17642E 01	0.18107E 02	0.31126E 01	0.33254E 03
2.200	0.16581E 01	0.18229E 02	0.27494E 01	0.33642E 03
2.300	0.15595E 01	0.18339E 02	0.24633E 01	0.33968E 03
2.400	0.14950E 01	0.18439E 02	0.22350E 01	0.34244E 03
2.500	0.14316E 01	0.18531E 02	0.20500E 01	0.34478E 03
2.700	0.13302E 01	0.18695E 02	0.17693E 01	0.34856E 03
2.900	0.12505E 01	0.18840E 02	0.15637E 01	0.35154E 03
3.100	0.11837E 01	0.18969E 02	0.14012E 01	0.35405E 03
3.300	0.11243E 01	0.19086E 02	0.12640E 01	0.35629E 03
3.500	0.10689E 01	0.19191E 02	0.11426E 01	0.35839E 03

SC K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(1) 2D

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.21000E 02	0.12636E-03	0.44100E 03	0.39918E-08
0.025	0.20762E 02	0.39660E 00	0.43107E 03	0.56557E-01
0.050	0.20125E 02	0.13217E 01	0.40503E 03	0.76478E 00
0.075	0.19264E 02	0.23075E 01	0.37111E 03	0.30131E 01
0.100	0.18344E 02	0.31296E 01	0.33649E 03	0.70558E 01
0.125	0.17458E 02	0.38214E 01	0.30478E 03	0.12547E 02
0.150	0.16633E 02	0.44714E 01	0.27664E 03	0.19075E 02
0.175	0.15859E 02	0.51203E 01	0.25151E 03	0.26430E 02
0.200	0.15121E 02	0.57671E 01	0.22865E 03	0.34560E 02
0.225	0.14408E 02	0.63984E 01	0.20759E 03	0.43454E 02
0.250	0.13716E 02	0.70039E 01	0.18812E 03	0.53061E 02
0.275	0.13046E 02	0.75794E 01	0.17020E 03	0.63264E 02
0.300	0.12404E 02	0.81249E 01	0.15386E 03	0.73893E 02
0.325	0.11794E 02	0.86418E 01	0.13911E 03	0.84743E 02
0.350	0.11222E 02	0.91317E 01	0.12594E 03	0.95601E 02
0.375	0.10691E 02	0.95958E 01	0.11430E 03	0.10627E 03
0.400	0.10203E 02	0.10034E 02	0.10410E 03	0.11658E 03
0.425	0.97577E 01	0.10447E 02	0.95212E 02	0.12639E 03
0.450	0.93543E 01	0.10835E 02	0.87504E 02	0.13562E 03
0.475	0.89909E 01	0.11197E 02	0.80836E 02	0.14422E 03
0.500	0.86645E 01	0.11535E 02	0.75074E 02	0.15216E 03
0.550	0.81096E 01	0.12142E 02	0.65765E 02	0.16616E 03
0.600	0.76611E 01	0.12667E 02	0.58692E 02	0.17793E 03
0.650	0.72913E 01	0.13126E 02	0.53164E 02	0.18793E 03
0.700	0.69765E 01	0.13534E 02	0.48671E 02	0.19666E 03
0.750	0.66973E 01	0.13905E 02	0.44854E 02	0.20457E 03
0.800	0.64398E 01	0.14249E 02	0.41471E 02	0.21200E 03
0.850	0.61940E 01	0.14573E 02	0.38365E 02	0.21922E 03
0.900	0.59537E 01	0.14881E 02	0.35447E 02	0.22639E 03
0.950	0.57155E 01	0.15175E 02	0.32667E 02	0.23362E 03
1.000	0.54779E 01	0.15458E 02	0.30008E 02	0.24093E 03
1.100	0.50052E 01	0.15988E 02	0.25052E 02	0.25583E 03
1.200	0.45430E 01	0.16470E 02	0.20639E 02	0.27083E 03
1.300	0.41027E 01	0.16904E 02	0.16832E 02	0.28552E 03
1.400	0.36941E 01	0.17290E 02	0.13647E 02	0.29949E 03
1.500	0.33239E 01	0.17630E 02	0.11049E 02	0.31244E 03
1.600	0.29951E 01	0.17928E 02	0.89706E 01	0.32418E 03
1.700	0.27077E 01	0.18187E 02	0.73318E 01	0.33461E 03
1.800	0.24599E 01	0.18413E 02	0.60510E 01	0.34374E 03
1.900	0.22483E 01	0.18610E 02	0.50549E 01	0.35163E 03
2.000	0.20691E 01	0.18782E 02	0.42810E 01	0.35838E 03
2.100	0.19180E 01	0.18934E 02	0.36787E 01	0.36412E 03
2.200	0.17910E 01	0.19069E 02	0.32077E 01	0.36899E 03
2.300	0.16843E 01	0.19189E 02	0.28368E 01	0.37310E 03
2.400	0.15944E 01	0.19298E 02	0.25422E 01	0.37658E 03
2.500	0.15184E 01	0.19397E 02	0.23056E 01	0.37953E 03
2.700	0.13979E 01	0.19572E 02	0.19541E 01	0.38424E 03
2.900	0.13065E 01	0.19725E 02	0.17070E 01	0.38783E 03
3.100	0.12332E 01	0.19860E 02	0.15208E 01	0.39073E 03
3.300	0.11708E 01	0.19982E 02	0.13708E 01	0.39320E 03
3.500	0.11148E 01	0.20093E 02	0.12427E 01	0.39542E 03

TI K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(2) 3F

F			S		F**2		(N-F)**2	
0.000	0.22000E	02	0.67472E	-04	0.48400E	03	0.11462E	-08
0.025	0.21775E	02	0.37165E	00	0.47415E	03	0.50652E	-01
0.050	0.21166E	02	0.12587E	01	0.44798E	03	0.69628E	00
0.075	0.20325E	02	0.22411E	01	0.41309E	03	0.28070E	01
0.100	0.19403E	02	0.30891E	01	0.37649E	03	0.67429E	01
0.125	0.18495E	02	0.38067E	01	0.34208E	03	0.12283E	02
0.150	0.17635E	02	0.44705E	01	0.31099E	03	0.19053E	02
0.175	0.16822E	02	0.51263E	01	0.28298E	03	0.26811E	02
0.200	0.16046E	02	0.57811E	01	0.25746E	03	0.35454E	02
0.225	0.15296E	02	0.64250E	01	0.23397E	03	0.44942E	02
0.250	0.14569E	02	0.70476E	01	0.21226E	03	0.55215E	02
0.275	0.13865E	02	0.76431E	01	0.19225E	03	0.66170E	02
0.300	0.13188E	02	0.82098E	01	0.17393E	03	0.77650E	02
0.325	0.12542E	02	0.87485E	01	0.15729E	03	0.89461E	02
0.350	0.11931E	02	0.92609E	01	0.14234E	03	0.10139E	03
0.375	0.11359E	02	0.97483E	01	0.12902E	03	0.11324E	03
0.400	0.10828E	02	0.10212E	02	0.11724E	03	0.12482E	03
0.425	0.10339E	02	0.10652E	02	0.10690E	03	0.13597E	03
0.450	0.98927E	01	0.11069E	02	0.97865E	02	0.14659E	03
0.475	0.94869E	01	0.11462E	02	0.90002E	02	0.15658E	03
0.500	0.91199E	01	0.11832E	02	0.83172E	02	0.16590E	03
0.550	0.84909E	01	0.12505E	02	0.72096E	02	0.18249E	03
0.600	0.79812E	01	0.13093E	02	0.63699E	02	0.19653E	03
0.650	0.75647E	01	0.13607E	02	0.57225E	02	0.20838E	03
0.700	0.72176E	01	0.14061E	02	0.52094E	02	0.21852E	03
0.750	0.69196E	01	0.14467E	02	0.47880E	02	0.22742E	03
0.800	0.66543E	01	0.14836E	02	0.44279E	02	0.23549E	03
0.850	0.64096E	01	0.15177E	02	0.41083E	02	0.24306E	03
0.900	0.61768E	01	0.15496E	02	0.38153E	02	0.25037E	03
0.950	0.59503E	01	0.15799E	02	0.35406E	02	0.25759E	03
1.000	0.57265E	01	0.16087E	02	0.32793E	02	0.26483E	03
1.100	0.52819E	01	0.16627E	02	0.27899E	02	0.27949E	03
1.200	0.48418E	01	0.17120E	02	0.23443E	02	0.29440E	03
1.300	0.44135E	01	0.17569E	02	0.19479E	02	0.30928E	03
1.400	0.40063E	01	0.17973E	02	0.16051E	02	0.32377E	03
1.500	0.36280E	01	0.18333E	02	0.13162E	02	0.33753E	03
1.600	0.32837E	01	0.18652E	02	0.10783E	02	0.35030E	03
1.700	0.29758E	01	0.18933E	02	0.88555E	01	0.36192E	03
1.800	0.27046E	01	0.19179E	02	0.73148E	01	0.37231E	03
1.900	0.24685E	01	0.19396E	02	0.60934E	01	0.38148E	03
2.000	0.22649E	01	0.19585E	02	0.51298E	01	0.38947E	03
2.100	0.20907E	01	0.19753E	02	0.43709E	01	0.39638E	03
2.200	0.19423E	01	0.19901E	02	0.37726E	01	0.40231E	03
2.300	0.18164E	01	0.20033E	02	0.32993E	01	0.40738E	03
2.400	0.17096E	01	0.20152E	02	0.29227E	01	0.41170E	03
2.500	0.16189E	01	0.20259E	02	0.26209E	01	0.41539E	03
2.700	0.14756E	01	0.20447E	02	0.21773E	01	0.42125E	03
2.900	0.13688E	01	0.20609E	02	0.18735E	01	0.42565E	03
3.100	0.12858E	01	0.20751E	02	0.16533E	01	0.42908E	03
3.300	0.12179E	01	0.20879E	02	0.14833E	01	0.43189E	03
3.500	0.11593E	01	0.20994E	02	0.13440E	01	0.43433E	03

V K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(3) 4F

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.23000E	02	-0.22483E	-03		0.52901E	03		0.12610E	-07	
0.025	0.22786E	02	0.34990E	00		0.51922E	03		0.45633E	-01	
0.050	0.22202E	02	0.12012E	01		0.49295E	03		0.63608E	00	
0.075	0.21384E	02	0.21736E	01		0.45726E	03		0.26128E	01	
0.100	0.20469E	02	0.30373E	01		0.41897E	03		0.64071E	01	
0.125	0.19550E	02	0.37747E	01		0.38221E	03		0.11901E	02	
0.150	0.18667E	02	0.44510E	01		0.34845E	03		0.18776E	02	
0.175	0.17824E	02	0.51140E	01		0.31771E	03		0.26787E	02	
0.200	0.17016E	02	0.57761E	01		0.28954E	03		0.35810E	02	
0.225	0.16234E	02	0.64311E	01		0.26353E	03		0.45785E	02	
0.250	0.15474E	02	0.70688E	01		0.23944E	03		0.56645E	02	
0.275	0.14736E	02	0.76824E	01		0.21716E	03		0.68287E	02	
0.300	0.14024E	02	0.82688E	01		0.19668E	03		0.80563E	02	
0.325	0.13342E	02	0.88281E	01		0.17800E	03		0.93286E	02	
0.350	0.12692E	02	0.93612E	01		0.16109E	03		0.10625E	03	
0.375	0.12080E	02	0.98699E	01		0.14593E	03		0.11925E	03	
0.400	0.11507E	02	0.10355E	02		0.13242E	03		0.13208E	03	
0.425	0.10976E	02	0.10819E	02		0.12048E	03		0.14457E	03	
0.450	0.10486E	02	0.11260E	02		0.10997E	03		0.15659E	03	
0.475	0.10038E	02	0.11680E	02		0.10076E	03		0.16802E	03	
0.500	0.96287E	01	0.12078E	02		0.92712E	02		0.17879E	03	
0.550	0.89210E	01	0.12809E	02		0.79584E	02		0.19822E	03	
0.600	0.83426E	01	0.13458E	02		0.69598E	02		0.21484E	03	
0.650	0.78699E	01	0.14030E	02		0.61935E	02		0.22892E	03	
0.700	0.74798E	01	0.14535E	02		0.55948E	02		0.24088E	03	
0.750	0.71516E	01	0.14984E	02		0.51145E	02		0.25117E	03	
0.800	0.68677E	01	0.15387E	02		0.47166E	02		0.26025E	03	
0.850	0.66143E	01	0.15754E	02		0.43749E	02		0.26849E	03	
0.900	0.63806E	01	0.16094E	02		0.40712E	02		0.27620E	03	
0.950	0.61590E	01	0.16411E	02		0.37933E	02		0.28362E	03	
1.000	0.59442E	01	0.16709E	02		0.35333E	02		0.29090E	03	
1.100	0.55231E	01	0.17264E	02		0.30505E	02		0.30544E	03	
1.200	0.51064E	01	0.17770E	02		0.26076E	02		0.32018E	03	
1.300	0.46956E	01	0.18233E	02		0.22049E	02		0.33505E	03	
1.400	0.42974E	01	0.18653E	02		0.18467E	02		0.34979E	03	
1.500	0.39193E	01	0.19031E	02		0.15361E	02		0.36407E	03	
1.600	0.35674E	01	0.19369E	02		0.12727E	02		0.37762E	03	
1.700	0.32460E	01	0.19670E	02		0.10536E	02		0.39022E	03	
1.800	0.29569E	01	0.19937E	02		0.87433E	01		0.40173E	03	
1.900	0.27004E	01	0.20172E	02		0.72922E	01		0.41207E	03	
2.000	0.24753E	01	0.20379E	02		0.61271E	01		0.42126E	03	
2.100	0.22795E	01	0.20563E	02		0.51961E	01		0.42934E	03	
2.200	0.21104E	01	0.20725E	02		0.44537E	01		0.43638E	03	
2.300	0.19650E	01	0.20870E	02		0.38613E	01		0.44247E	03	
2.400	0.18405E	01	0.21000E	02		0.33875E	01		0.44772E	03	
2.500	0.17340E	01	0.21116E	02		0.30069E	01		0.45224E	03	
2.700	0.15648E	01	0.21319E	02		0.24485E	01		0.45947E	03	
2.900	0.14392E	01	0.21492E	02		0.20713E	01		0.46487E	03	
3.100	0.13435E	01	0.21642E	02		0.18049E	01		0.46901E	03	
3.300	0.12675E	01	0.21775E	02		0.16065E	01		0.47230E	03	
3.500	0.12042E	01	0.21896E	02		0.14501E	01		0.47506E	03	

CR K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(4) 5D

F		S	F**2		(N-F)**2
0.000	0.24000E 02	0.15712E-03	0.57600E 03	0.61902E-08	
0.025	0.23796E 02	0.33138E 00	0.56626E 03	0.41502E-01	
0.050	0.23236E 02	0.11489E 01	0.53991E 03	0.58372E 00	
0.075	0.22440E 02	0.21069E 01	0.50355E 03	0.24335E 01	
0.100	0.21536E 02	0.29799E 01	0.46381E 03	0.60702E 01	
0.125	0.20614E 02	0.37335E 01	0.42493E 03	0.11466E 02	
0.150	0.19715E 02	0.44212E 01	0.38870E 03	0.18358E 02	
0.175	0.18851E 02	0.50907E 01	0.35537E 03	0.26511E 02	
0.200	0.18017E 02	0.57588E 01	0.32463E 03	0.35792E 02	
0.225	0.17208E 02	0.64224E 01	0.29612E 03	0.46130E 02	
0.250	0.16420E 02	0.70726E 01	0.26960E 03	0.57462E 02	
0.275	0.15652E 02	0.77018E 01	0.24498E 03	0.69690E 02	
0.300	0.14907E 02	0.83060E 01	0.22223E 03	0.82675E 02	
0.325	0.14190E 02	0.88841E 01	0.20135E 03	0.96237E 02	
0.350	0.13504E 02	0.94368E 01	0.18235E 03	0.11017E 03	
0.375	0.12852E 02	0.99652E 01	0.16518E 03	0.12427E 03	
0.400	0.12239E 02	0.10471E 02	0.14979E 03	0.13833E 03	
0.425	0.11665E 02	0.10955E 02	0.13608E 03	0.15215E 03	
0.450	0.11133E 02	0.11418E 02	0.12393E 03	0.16557E 03	
0.475	0.10641E 02	0.11860E 02	0.11323E 03	0.17847E 03	
0.500	0.10189E 02	0.12283E 02	0.10382E 03	0.19074E 03	
0.550	0.94000E 01	0.13067E 02	0.88361E 02	0.21316E 03	
0.600	0.87483E 01	0.13772E 02	0.76533E 02	0.23261E 03	
0.650	0.82129E 01	0.14400E 02	0.67451E 02	0.24923E 03	
0.700	0.77719E 01	0.14959E 02	0.60403E 02	0.26335E 03	
0.750	0.74048E 01	0.15455E 02	0.54831E 02	0.27540E 03	
0.800	0.70932E 01	0.15899E 02	0.50314E 02	0.28584E 03	
0.850	0.68221E 01	0.16300E 02	0.46541E 02	0.29508E 03	
0.900	0.65791E 01	0.16666E 02	0.43284E 02	0.30349E 03	
0.950	0.63550E 01	0.17003E 02	0.40385E 02	0.31135E 03	
1.000	0.61428E 01	0.17318E 02	0.37734E 02	0.31888E 03	
1.100	0.57367E 01	0.17895E 02	0.32910E 02	0.33355E 03	
1.200	0.53402E 01	0.18417E 02	0.28518E 02	0.34819E 03	
1.300	0.49482E 01	0.18894E 02	0.24484E 02	0.36297E 03	
1.400	0.45635E 01	0.19329E 02	0.20825E 02	0.37778E 03	
1.500	0.41920E 01	0.19724E 02	0.17573E 02	0.39236E 03	
1.600	0.38397E 01	0.20080E 02	0.14743E 02	0.40644E 03	
1.700	0.35115E 01	0.20399E 02	0.12331E 02	0.41978E 03	
1.800	0.32106E 01	0.20685E 02	0.10308E 02	0.43220E 03	
1.900	0.29386E 01	0.20938E 02	0.86352E 01	0.44358E 03	
2.000	0.26956E 01	0.21164E 02	0.72663E 01	0.45388E 03	
2.100	0.24808E 01	0.21364E 02	0.61543E 01	0.46308E 03	
2.200	0.22924E 01	0.21541E 02	0.52551E 01	0.47122E 03	
2.300	0.21283E 01	0.21699E 02	0.45297E 01	0.47837E 03	
2.400	0.19861E 01	0.21841E 02	0.39446E 01	0.48461E 03	
2.500	0.18632E 01	0.21968E 02	0.34717E 01	0.49004E 03	
2.700	0.16660E 01	0.22188E 02	0.27757E 01	0.49881E 03	
2.900	0.15190E 01	0.22372E 02	0.23074E 01	0.50539E 03	
3.100	0.14077E 01	0.22531E 02	0.19817E 01	0.51041E 03	
3.300	0.13211E 01	0.22672E 02	0.17453E 01	0.51433E 03	
3.500	0.12510E 01	0.22797E 02	0.15651E 01	0.51752E 03	

MN K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(5) 6S

F			S		F**2		(N-F)**2
0.000	0.25000E	02	0.17786E	-03	0.62500E	03	0.79510E-08
0.025	0.24806E	02	0.31475E	00	0.61532E	03	0.37804E-01
0.050	0.24268E	02	0.11008E	01	0.58891E	03	0.53647E 00
0.075	0.23495E	02	0.20411E	01	0.55201E	03	0.22651E 01
0.100	0.22606E	02	0.29154E	01	0.51103E	03	0.57309E 01
0.125	0.21687E	02	0.36776E	01	0.47032E	03	0.10977E 02
0.150	0.20781E	02	0.43721E	01	0.43185E	03	0.17801E 02
0.175	0.19902E	02	0.50460E	01	0.39607E	03	0.25994E 02
0.200	0.19048E	02	0.57194E	01	0.36282E	03	0.35430E 02
0.225	0.18215E	02	0.63916E	01	0.33179E	03	0.46035E 02
0.250	0.17401E	02	0.70544E	01	0.30280E	03	0.57744E 02
0.275	0.16606E	02	0.76996E	01	0.27575E	03	0.70462E 02
0.300	0.15832E	02	0.83218E	01	0.25065E	03	0.84053E 02
0.325	0.15083E	02	0.89189E	01	0.22750E	03	0.98347E 02
0.350	0.14363E	02	0.94906E	01	0.20630E	03	0.11315E 03
0.375	0.13676E	02	0.10038E	02	0.18703E	03	0.12824E 03
0.400	0.13024E	02	0.10562E	02	0.16964E	03	0.14341E 03
0.425	0.12411E	02	0.11065E	02	0.15404E	03	0.15848E 03
0.450	0.11838E	02	0.11548E	02	0.14013E	03	0.17325E 03
0.475	0.11304E	02	0.12011E	02	0.12778E	03	0.18758E 03
0.500	0.10810E	02	0.12454E	02	0.11686E	03	0.20135E 03
0.550	0.99378E	01	0.13284E	02	0.98761E	02	0.22687E 03
0.600	0.92073E	01	0.14037E	02	0.84774E	02	0.24941E 03
0.650	0.86008E	01	0.14717E	02	0.73974E	02	0.26893E 03
0.700	0.80989E	01	0.15327E	02	0.65592E	02	0.28565E 03
0.750	0.76820E	01	0.15872E	02	0.59013E	02	0.29991E 03
0.800	0.73322E	01	0.16361E	02	0.53761E	02	0.31215E 03
0.850	0.70337E	01	0.16801E	02	0.49472E	02	0.32279E 03
0.900	0.67731E	01	0.17200E	02	0.45875E	02	0.33222E 03
0.950	0.65398E	01	0.17565E	02	0.42769E	02	0.34078E 03
1.000	0.63251E	01	0.17903E	02	0.40007E	02	0.34875E 03
1.100	0.59278E	01	0.18512E	02	0.35139E	02	0.36375E 03
1.200	0.55495E	01	0.19057E	02	0.30797E	02	0.37832E 03
1.300	0.51770E	01	0.19550E	02	0.26801E	02	0.39295E 03
1.400	0.48084E	01	0.20001E	02	0.23121E	02	0.40770E 03
1.500	0.44473E	01	0.20411E	02	0.19778E	02	0.42241E 03
1.600	0.40990E	01	0.20784E	02	0.16802E	02	0.43685E 03
1.700	0.37687E	01	0.21121E	02	0.14203E	02	0.45077E 03
1.800	0.34606E	01	0.21425E	02	0.11976E	02	0.46395E 03
1.900	0.31774E	01	0.21696E	02	0.10096E	02	0.47623E 03
2.000	0.29203E	01	0.21939E	02	0.85282E	01	0.48751E 03
2.100	0.26896E	01	0.22155E	02	0.72337E	01	0.49776E 03
2.200	0.24843E	01	0.22348E	02	0.61718E	01	0.50696E 03
2.300	0.23031E	01	0.22520E	02	0.53044E	01	0.51515E 03
2.400	0.21442E	01	0.22675E	02	0.45975E	01	0.52239E 03
2.500	0.20054E	01	0.22813E	02	0.40216E	01	0.52875E 03
2.700	0.17797E	01	0.23051E	02	0.31672E	01	0.53918E 03
2.900	0.16094E	01	0.23250E	02	0.25902E	01	0.54712E 03
3.100	0.14802E	01	0.23419E	02	0.21911E	01	0.55318E 03
3.300	0.13805E	01	0.23567E	02	0.19058E	01	0.55788E 03
3.500	0.13014E	01	0.23698E	02	0.16936E	01	0.56162E 03

FE K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(6) 5D

	F		S		F**2		(N-F)**2
0.000	0.26000E 02		0.21482E-03		0.67599E 03		0.11613E-07
0.025	0.25814E 02		0.29971E 00		0.66636E 03		0.34591E-01
0.050	0.25296E 02		0.10585E 01		0.63989E 03		0.49543E 00
0.075	0.24544E 02		0.19880E 01		0.60240E 03		0.21203E 01
0.100	0.23666E 02		0.28736E 01		0.56009E 03		0.54469E 01
0.125	0.22746E 02		0.36556E 01		0.51738E 03		0.10589E 02
0.150	0.21829E 02		0.43661E 01		0.47651E 03		0.17396E 02
0.175	0.20933E 02		0.50494E 01		0.43819E 03		0.25676E 02
0.200	0.20059E 02		0.57286E 01		0.40237E 03		0.35294E 02
0.225	0.19205E 02		0.64065E 01		0.36884E 03		0.46169E 02
0.250	0.18369E 02		0.70770E 01		0.33742E 03		0.58230E 02
0.275	0.17551E 02		0.77323E 01		0.30804E 03		0.71386E 02
0.300	0.16753E 02		0.83669E 01		0.28066E 03		0.85508E 02
0.325	0.15978E 02		0.89778E 01		0.25530E 03		0.10044E 03
0.350	0.15230E 02		0.95642E 01		0.23196E 03		0.11598E 03
0.375	0.14513E 02		0.10127E 02		0.21063E 03		0.13195E 03
0.400	0.13830E 02		0.10667E 02		0.19126E 03		0.14812E 03
0.425	0.13182E 02		0.11186E 02		0.17377E 03		0.16429E 03
0.450	0.12573E 02		0.11685E 02		0.15807E 03		0.18029E 03
0.475	0.12002E 02		0.12164E 02		0.14404E 03		0.19595E 03
0.500	0.11470E 02		0.12626E 02		0.13155E 03		0.21113E 03
0.550	0.10520E 02		0.13494E 02		0.11066E 03		0.23964E 03
0.600	0.97134E 01		0.14291E 02		0.94351E 02		0.26525E 03
0.650	0.90364E 01		0.15017E 02		0.81657E 02		0.28776E 03
0.700	0.84714E 01		0.15673E 02		0.71764E 02		0.30725E 03
0.750	0.80003E 01		0.16265E 02		0.64005E 02		0.32399E 03
0.800	0.76058E 01		0.16798E 02		0.57849E 02		0.33835E 03
0.850	0.72722E 01		0.17278E 02		0.52885E 02		0.35073E 03
0.900	0.69856E 01		0.17712E 02		0.48799E 02		0.36155E 03
0.950	0.67344E 01		0.18107E 02		0.45352E 02		0.37116E 03
1.000	0.65089E 01		0.18470E 02		0.42365E 02		0.37990E 03
1.100	0.61065E 01		0.19118E 02		0.37289E 02		0.39575E 03
1.200	0.57372E 01		0.19689E 02		0.32916E 02		0.41058E 03
1.300	0.53804E 01		0.20202E 02		0.28948E 02		0.42517E 03
1.400	0.50282E 01		0.20668E 02		0.25283E 02		0.43982E 03
1.500	0.46806E 01		0.21094E 02		0.21908E 02		0.45452E 03
1.600	0.43410E 01		0.21483E 02		0.18845E 02		0.46911E 03
1.700	0.40141E 01		0.21836E 02		0.16113E 02		0.48338E 03
1.800	0.37042E 01		0.22156E 02		0.13721E 02		0.49710E 03
1.900	0.34146E 01		0.22445E 02		0.11659E 02		0.51010E 03
2.000	0.31475E 01		0.22705E 02		0.99069E 01		0.52224E 03
2.100	0.29041E 01		0.22937E 02		0.84339E 01		0.53342E 03
2.200	0.26845E 01		0.23146E 02		0.72063E 01		0.54361E 03
2.300	0.24879E 01		0.23333E 02		0.61898E 01		0.55282E 03
2.400	0.23133E 01		0.23500E 02		0.53515E 01		0.56106E 03
2.500	0.21591E 01		0.23650E 02		0.46618E 01		0.56839E 03
2.700	0.19047E 01		0.23909E 02		0.36278E 01		0.58058E 03
2.900	0.17100E 01		0.24123E 02		0.29240E 01		0.59001E 03
3.100	0.15611E 01		0.24304E 02		0.24371E 01		0.59726E 03
3.300	0.14464E 01		0.24460E 02		0.20921E 01		0.60288E 03
3.500	0.13563E 01		0.24598E 02		0.18396E 01		0.60731E 03

CO K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(7) 4F

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.27000E 02	0.32616E-03	0.72899E 03	0.26595E-07
0.025	0.26822E 02	0.28635E 00	0.71940E 03	0.31836E-01
0.050	0.26323E 02	0.10186E 01	0.69288E 03	0.45887E 00
0.075	0.25591E 02	0.19325E 01	0.65492E 03	0.19839E 01
0.100	0.24729E 02	0.28212E 01	0.61151E 03	0.51587E 01
0.125	0.23813E 02	0.36164E 01	0.56708E 03	0.10154E 02
0.150	0.22892E 02	0.43394E 01	0.52404E 03	0.16876E 02
0.175	0.21984E 02	0.50309E 01	0.48331E 03	0.25157E 02
0.200	0.21095E 02	0.57154E 01	0.44501E 03	0.34867E 02
0.225	0.20224E 02	0.63988E 01	0.40900E 03	0.45918E 02
0.250	0.19369E 02	0.70767E 01	0.37514E 03	0.58239E 02
0.275	0.18530E 02	0.77419E 01	0.34336E 03	0.71743E 02
0.300	0.17710E 02	0.83886E 01	0.31363E 03	0.86312E 02
0.325	0.16911E 02	0.90131E 01	0.28597E 03	0.10180E 03
0.350	0.16136E 02	0.96142E 01	0.26038E 03	0.11802E 03
0.375	0.15390E 02	0.10192E 02	0.23686E 03	0.13478E 03
0.400	0.14676E 02	0.10747E 02	0.21538E 03	0.15188E 03
0.425	0.13995E 02	0.11281E 02	0.19587E 03	0.16912E 03
0.450	0.13351E 02	0.11796E 02	0.17825E 03	0.18630E 03
0.475	0.12744E 02	0.12292E 02	0.16240E 03	0.20324E 03
0.500	0.12174E 02	0.12770E 02	0.14821E 03	0.21980E 03
0.550	0.11148E 02	0.13673E 02	0.12428E 03	0.25128E 03
0.600	0.10266E 02	0.14509E 02	0.10540E 03	0.28001E 03
0.650	0.95176E 01	0.15277E 02	0.90584E 02	0.30564E 03
0.700	0.88864E 01	0.15979E 02	0.78969E 02	0.32810E 03
0.750	0.83567E 01	0.16616E 02	0.69835E 02	0.34757E 03
0.800	0.79120E 01	0.17192E 02	0.62600E 02	0.36435E 03
0.850	0.75369E 01	0.17713E 02	0.56805E 02	0.37881E 03
0.900	0.72174E 01	0.18185E 02	0.52091E 02	0.39135E 03
0.950	0.69414E 01	0.18614E 02	0.48182E 02	0.40235E 03
1.000	0.66983E 01	0.19006E 02	0.44868E 02	0.41216E 03
1.100	0.62790E 01	0.19701E 02	0.39426E 02	0.42936E 03
1.200	0.59102E 01	0.20305E 02	0.34931E 02	0.44478E 03
1.300	0.55638E 01	0.20842E 02	0.30955E 02	0.45951E 03
1.400	0.52259E 01	0.21328E 02	0.27310E 02	0.47411E 03
1.500	0.48924E 01	0.21770E 02	0.23935E 02	0.48875E 03
1.600	0.45639E 01	0.22175E 02	0.20830E 02	0.50338E 03
1.700	0.42439E 01	0.22544E 02	0.18011E 02	0.51784E 03
1.800	0.39362E 01	0.22880E 02	0.15494E 02	0.53194E 03
1.900	0.36444E 01	0.23185E 02	0.13282E 02	0.54548E 03
2.000	0.33713E 01	0.23461E 02	0.11366E 02	0.55831E 03
2.100	0.31188E 01	0.23710E 02	0.97268E 01	0.57031E 03
2.200	0.28877E 01	0.23934E 02	0.83388E 01	0.58140E 03
2.300	0.26782E 01	0.24136E 02	0.71727E 01	0.59155E 03
2.400	0.24897E 01	0.24317E 02	0.61988E 01	0.60075E 03
2.500	0.23213E 01	0.24480E 02	0.53886E 01	0.60904E 03
2.700	0.20393E 01	0.24760E 02	0.41588E 01	0.62304E 03
2.900	0.18199E 01	0.24991E 02	0.33119E 01	0.63404E 03
3.100	0.16503E 01	0.25185E 02	0.27234E 01	0.64261E 03
3.300	0.15190E 01	0.25352E 02	0.23075E 01	0.64928E 03
3.500	0.14164E 01	0.25497E 02	0.20061E 01	0.65452E 03

NI K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(8) 3F

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.28000E 02	0.14496E-03	0.78400E 03	0.52532E-08
0.025	0.27829E 02	0.27434E 00	0.77443E 03	0.29392E-01
0.050	0.27347E 02	0.98276E 00	0.74786E 03	0.42646E 00
0.075	0.26636E 02	0.18811E 01	0.70948E 03	0.18504E 01
0.100	0.25789E 02	0.27707E 01	0.66507E 03	0.48891E 01
0.125	0.24881E 02	0.35762E 01	0.61906E 03	0.97285E 01
0.150	0.23959E 02	0.43098E 01	0.57403E 03	0.16331E 02
0.175	0.23044E 02	0.50081E 01	0.53104E 03	0.24558E 02
0.200	0.22144E 02	0.56966E 01	0.49038E 03	0.34288E 02
0.225	0.21259E 02	0.63836E 01	0.45196E 03	0.45436E 02
0.250	0.20389E 02	0.70667E 01	0.41569E 03	0.57934E 02
0.275	0.19532E 02	0.77395E 01	0.38150E 03	0.71705E 02
0.300	0.18692E 02	0.83963E 01	0.34938E 03	0.86643E 02
0.325	0.17870E 02	0.90330E 01	0.31935E 03	0.10261E 03
0.350	0.17071E 02	0.96476E 01	0.29143E 03	0.11944E 03
0.375	0.16298E 02	0.10240E 02	0.26563E 03	0.13693E 03
0.400	0.15554E 02	0.10810E 02	0.24193E 03	0.15490E 03
0.425	0.14842E 02	0.11359E 02	0.22029E 03	0.17313E 03
0.450	0.14164E 02	0.11889E 02	0.20063E 03	0.19143E 03
0.475	0.13522E 02	0.12400E 02	0.18285E 03	0.20960E 03
0.500	0.12917E 02	0.12894E 02	0.16685E 03	0.22750E 03
0.550	0.11817E 02	0.13831E 02	0.13965E 03	0.26188E 03
0.600	0.10862E 02	0.14703E 02	0.11798E 03	0.29371E 03
0.650	0.10042E 02	0.15510E 02	0.10085E 03	0.32248E 03
0.700	0.93446E 01	0.16253E 02	0.87322E 02	0.34802E 03
0.750	0.87544E 01	0.16933E 02	0.76640E 02	0.37039E 03
0.800	0.82562E 01	0.17553E 02	0.68165E 02	0.38982E 03
0.850	0.78350E 01	0.18115E 02	0.61387E 02	0.40663E 03
0.900	0.74770E 01	0.18626E 02	0.55906E 02	0.42119E 03
0.950	0.71698E 01	0.19091E 02	0.51406E 02	0.43390E 03
1.000	0.69027E 01	0.19515E 02	0.47647E 02	0.44510E 03
1.100	0.64535E 01	0.20262E 02	0.41647E 02	0.46425E 03
1.200	0.60743E 01	0.20904E 02	0.36898E 02	0.48073E 03
1.300	0.57306E 01	0.21470E 02	0.32840E 02	0.49593E 03
1.400	0.54029E 01	0.21978E 02	0.29192E 02	0.51063E 03
1.500	0.50823E 01	0.22439E 02	0.25830E 02	0.52522E 03
1.600	0.47663E 01	0.22860E 02	0.22718E 02	0.53980E 03
1.700	0.44561E 01	0.23245E 02	0.19857E 02	0.55431E 03
1.800	0.41546E 01	0.23597E 02	0.17260E 02	0.56860E 03
1.900	0.38649E 01	0.23918E 02	0.14937E 02	0.58250E 03
2.000	0.35901E 01	0.24210E 02	0.12889E 02	0.59585E 03
2.100	0.33324E 01	0.24475E 02	0.11105E 02	0.60849E 03
2.200	0.30934E 01	0.24714E 02	0.95689E 01	0.62034E 03
2.300	0.28738E 01	0.24931E 02	0.82588E 01	0.63133E 03
2.400	0.26738E 01	0.25126E 02	0.71494E 01	0.64141E 03
2.500	0.24930E 01	0.25302E 02	0.62153E 01	0.65060E 03
2.700	0.21854E 01	0.25604E 02	0.47760E 01	0.66639E 03
2.900	0.19415E 01	0.25854E 02	0.37695E 01	0.67904E 03
3.100	0.17503E 01	0.26063E 02	0.30636E 01	0.68905E 03
3.300	0.16010E 01	0.26240E 02	0.25631E 01	0.69691E 03
3.500	0.14839E 01	0.26394E 02	0.22018E 01	0.70311E 03

CU K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(9) 2D

	F	S	F**2	(N-F)**2
0.000	0.29000E 02	0.14281E-03	0.84100E 03	0.51159E-08
0.025	0.28835E 02	0.26223E 00	0.83147E 03	0.27147E-01
0.050	0.28370E 02	0.94551E 00	0.80488E 03	0.39637E 00
0.075	0.27679E 02	0.18255E 01	0.76613E 03	0.17447E 01
0.100	0.26848E 02	0.27118E 01	0.72082E 03	0.46309E 01
0.125	0.25949E 02	0.35245E 01	0.67337E 03	0.93068E 01
0.150	0.25029E 02	0.42680E 01	0.62646E 03	0.15768E 02
0.175	0.24111E 02	0.49749E 01	0.58132E 03	0.23907E 02
0.200	0.23202E 02	0.56702E 01	0.53833E 03	0.33618E 02
0.225	0.22305E 02	0.63635E 01	0.49752E 03	0.44822E 02
0.250	0.21420E 02	0.70538E 01	0.45882E 03	0.57455E 02
0.275	0.20548E 02	0.77354E 01	0.42221E 03	0.71441E 02
0.300	0.19690E 02	0.84025E 01	0.38768E 03	0.86682E 02
0.325	0.18849E 02	0.90507E 01	0.35528E 03	0.10305E 03
0.350	0.18028E 02	0.96777E 01	0.32502E 03	0.12038E 03
0.375	0.17231E 02	0.10283E 02	0.29692E 03	0.13850E 03
0.400	0.16461E 02	0.10866E 02	0.27098E 03	0.15722E 03
0.425	0.15721E 02	0.11429E 02	0.24715E 03	0.17633E 03
0.450	0.15013E 02	0.11972E 02	0.22539E 03	0.19563E 03
0.475	0.14339E 02	0.12497E 02	0.20561E 03	0.21495E 03
0.500	0.13700E 02	0.13004E 02	0.18769E 03	0.23409E 03
0.550	0.12530E 02	0.13970E 02	0.15699E 03	0.27127E 03
0.600	0.11502E 02	0.14874E 02	0.13229E 03	0.30619E 03
0.650	0.10610E 02	0.15716E 02	0.11257E 03	0.33819E 03
0.700	0.98436E 01	0.16496E 02	0.96896E 02	0.36697E 03
0.750	0.91896E 01	0.17216E 02	0.84449E 02	0.39245E 03
0.800	0.86340E 01	0.17876E 02	0.74546E 02	0.41477E 03
0.850	0.81625E 01	0.18480E 02	0.66626E 02	0.43420E 03
0.900	0.77616E 01	0.19030E 02	0.60242E 02	0.45107E 03
0.950	0.74189E 01	0.19532E 02	0.55040E 02	0.46575E 03
1.000	0.71232E 01	0.19990E 02	0.50740E 02	0.47860E 03
1.100	0.66356E 01	0.20796E 02	0.44032E 02	0.50017E 03
1.200	0.62384E 01	0.21484E 02	0.38917E 02	0.51809E 03
1.300	0.58908E 01	0.22084E 02	0.34702E 02	0.53403E 03
1.400	0.55683E 01	0.22617E 02	0.31006E 02	0.54905E 03
1.500	0.52574E 01	0.23099E 02	0.27640E 02	0.56371E 03
1.600	0.49523E 01	0.23538E 02	0.24525E 02	0.57829E 03
1.700	0.46520E 01	0.23939E 02	0.21641E 02	0.59282E 03
1.800	0.43579E 01	0.24307E 02	0.18992E 02	0.60723E 03
1.900	0.40726E 01	0.24644E 02	0.16586E 02	0.62138E 03
2.000	0.37987E 01	0.24951E 02	0.14430E 02	0.63510E 03
2.100	0.35389E 01	0.25231E 02	0.12524E 02	0.64827E 03
2.200	0.32949E 01	0.25486E 02	0.10856E 02	0.66075E 03
2.300	0.30680E 01	0.25717E 02	0.94126E 01	0.67247E 03
2.400	0.28589E 01	0.25926E 02	0.81734E 01	0.68336E 03
2.500	0.26677E 01	0.26115E 02	0.71168E 01	0.69339E 03
2.700	0.23373E 01	0.26441E 02	0.54631E 01	0.71090E 03
2.900	0.20704E 01	0.26711E 02	0.42866E 01	0.72520E 03
3.100	0.18579E 01	0.26935E 02	0.34519E 01	0.73669E 03
3.300	0.16901E 01	0.27125E 02	0.28563E 01	0.74583E 03
3.500	0.15576E 01	0.27289E 02	0.24260E 01	0.75309E 03

ZN K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(2)3D(10) 1S

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.30000E 02	-0.23985E-03	0.90001E 03	0.14325E-07
0.025	0.29842E 02	0.25116E 00	0.89052E 03	0.25111E-01
0.050	0.29392E 02	0.91163E 00	0.86391E 03	0.36926E 00
0.075	0.28720E 02	0.17735E 01	0.82484E 03	0.16383E 01
0.100	0.27906E 02	0.26542E 01	0.77872E 03	0.43353E 01
0.125	0.27018E 02	0.34704E 01	0.72997E 03	0.88928E 01
0.150	0.26103E 02	0.42203E 01	0.68136E 03	0.15187E 02
0.175	0.25184E 02	0.49324E 01	0.63425E 03	0.23190E 02
0.200	0.24272E 02	0.56316E 01	0.58911E 03	0.32814E 02
0.225	0.23367E 02	0.63287E 01	0.54602E 03	0.43995E 02
0.250	0.22472E 02	0.70237E 01	0.50497E 03	0.56678E 02
0.275	0.21586E 02	0.77120E 01	0.46595E 03	0.70798E 02
0.300	0.20712E 02	0.83878E 01	0.42899E 03	0.86265E 02
0.325	0.19853E 02	0.90467E 01	0.39414E 03	0.10296E 03
0.350	0.19012E 02	0.96857E 01	0.36146E 03	0.12073E 03
0.375	0.18193E 02	0.10304E 02	0.33097E 03	0.13941E 03
0.400	0.17396E 02	0.10901E 02	0.30269E 03	0.15881E 03
0.425	0.16631E 02	0.11477E 02	0.27659E 03	0.17873E 03
0.450	0.15894E 02	0.12034E 02	0.25263E 03	0.19897E 03
0.475	0.15190E 02	0.12573E 02	0.23072E 03	0.21935E 03
0.500	0.14519E 02	0.13095E 02	0.21079E 03	0.23958E 03
0.550	0.13281E 02	0.14089E 02	0.17638E 03	0.27953E 03
0.600	0.12183E 02	0.15023E 02	0.14842E 03	0.31745E 03
0.650	0.11221E 02	0.15897E 02	0.12591E 03	0.35266E 03
0.700	0.10386E 02	0.16713E 02	0.10787E 03	0.38470E 03
0.750	0.96676E 01	0.17470E 02	0.93463E 02	0.41340E 03
0.800	0.90524E 01	0.18169E 02	0.81947E 02	0.43880E 03
0.850	0.85273E 01	0.18811E 02	0.72715E 02	0.46108E 03
0.900	0.80792E 01	0.19400E 02	0.65274E 02	0.48052E 03
0.950	0.76959E 01	0.19939E 02	0.59228E 02	0.49747E 03
1.000	0.73663E 01	0.20433E 02	0.54263E 02	0.51228E 03
1.100	0.68295E 01	0.21300E 02	0.46642E 02	0.53687E 03
1.200	0.64043E 01	0.22039E 02	0.41015E 02	0.55676E 03
1.300	0.60451E 01	0.22678E 02	0.36544E 02	0.57384E 03
1.400	0.57223E 01	0.23242E 02	0.32744E 02	0.58941E 03
1.500	0.54178E 01	0.23747E 02	0.29352E 02	0.60429E 03
1.600	0.51223E 01	0.24206E 02	0.26238E 02	0.61890E 03
1.700	0.48320E 01	0.24625E 02	0.23348E 02	0.63343E 03
1.800	0.45466E 01	0.25039E 02	0.20671E 02	0.64788E 03
1.900	0.42675E 01	0.25361E 02	0.18212E 02	0.66216E 03
2.000	0.39971E 01	0.25684E 02	0.15977E 02	0.67615E 03
2.100	0.37377E 01	0.25979E 02	0.13970E 02	0.68971E 03
2.200	0.34913E 01	0.26248E 02	0.12189E 02	0.70271E 03
2.300	0.32597E 01	0.26494E 02	0.10626E 02	0.71504E 03
2.400	0.30439E 01	0.26717E 02	0.92651E 01	0.72663E 03
2.500	0.28444E 01	0.26920E 02	0.80904E 01	0.73743E 03
2.700	0.24944E 01	0.27271E 02	0.62219E 01	0.75656E 03
2.900	0.22064E 01	0.27561E 02	0.48680E 01	0.77249E 03
3.100	0.19733E 01	0.27803E 02	0.38941E 01	0.78549E 03
3.300	0.17869E 01	0.28007E 02	0.31929E 01	0.79598E 03
3.500	0.16384E 01	0.28181E 02	0.26842E 01	0.80438E 03

GA K(2)L(8)M(18)4S(2)4P(1) 2P

F

S

F**2

(N-E)**2

0.000	0.31000E-02	0.23890E-03	0.96099E-03	0.14612E-07
0.025	0.30815E-02	0.26535E-03	0.94955E-03	0.34287E-01
0.050	0.30298E-02	0.95005E-03	0.91794E-03	0.49347E-00
0.075	0.29541E-02	0.18321E-01	0.87266E-03	0.21294E-01
0.100	0.28649E-02	0.27448E-01	0.82075E-03	0.55288E-01
0.125	0.27703E-02	0.36168E-01	0.76745E-03	0.10871E-02
0.150	0.26752E-02	0.44309E-01	0.71569E-03	0.16042E-02
0.175	0.25819E-02	0.51911E-01	0.66665E-03	0.26838E-02
0.200	0.24910E-02	0.59099E-01	0.62053E-03	0.37082E-02
0.225	0.24024E-02	0.66015E-01	0.57716E-03	0.48663E-02
0.250	0.23157E-02	0.72767E-01	0.53623E-03	0.61518E-02
0.275	0.22305E-02	0.79412E-01	0.49750E-03	0.75607E-02
0.300	0.21466E-02	0.85962E-01	0.46080E-03	0.90890E-02
0.325	0.20641E-02	0.92401E-01	0.42605E-03	0.10731E-03
0.350	0.19829E-02	0.98705E-01	0.39320E-03	0.12478E-03
0.375	0.19033E-02	0.10485E-02	0.36226E-03	0.14321E-03
0.400	0.18255E-02	0.11083E-02	0.33324E-03	0.16244E-03
0.425	0.17497E-02	0.11662E-02	0.30615E-03	0.18233E-03
0.450	0.16762E-02	0.12223E-02	0.28097E-03	0.20272E-03
0.475	0.16053E-02	0.12766E-02	0.25769E-03	0.22342E-03
0.500	0.15371E-02	0.13291E-02	0.23626E-03	0.24428E-03
0.550	0.14095E-02	0.14294E-02	0.19866E-03	0.28579E-03
0.600	0.12943E-02	0.15235E-02	0.16752E-03	0.32606E-03
0.650	0.11917E-02	0.16120E-02	0.14201E-03	0.36417E-03
0.700	0.11013E-02	0.16950E-02	0.12129E-03	0.39948E-03
0.750	0.10225E-02	0.17726E-02	0.10455E-03	0.43161E-03
0.800	0.95424E-03	0.18449E-02	0.91058E-03	0.46043E-03
0.850	0.89548E-03	0.19119E-02	0.80188E-03	0.48599E-03
0.900	0.84503E-03	0.19739E-02	0.71407E-03	0.50849E-03
0.950	0.80174E-03	0.20310E-02	0.64279E-03	0.52820E-03
1.000	0.76454E-03	0.20836E-02	0.58452E-03	0.54544E-03
1.100	0.70445E-03	0.21766E-02	0.49624E-03	0.57387E-03
1.200	0.65797E-03	0.22557E-02	0.43292E-03	0.59635E-03
1.300	0.62003E-03	0.23241E-02	0.38444E-03	0.61502E-03
1.400	0.58712E-03	0.23840E-02	0.34471E-03	0.63146E-03
1.500	0.55696E-03	0.24373E-02	0.31020E-03	0.64671E-03
1.600	0.52820E-03	0.24855E-02	0.27900E-03	0.66141E-03
1.700	0.50017E-03	0.25293E-02	0.25017E-03	0.67591E-03
1.800	0.47261E-03	0.25694E-02	0.22336E-03	0.69032E-03
1.900	0.44552E-03	0.26062E-02	0.19849E-03	0.70463E-03
2.000	0.41905E-03	0.26401E-02	0.17560E-03	0.71875E-03
2.100	0.39341E-03	0.26711E-02	0.15477E-03	0.73256E-03
2.200	0.36879E-03	0.26996E-02	0.13601E-03	0.74595E-03
2.300	0.34539E-03	0.27256E-02	0.11929E-03	0.75879E-03
2.400	0.32333E-03	0.27494E-02	0.10454E-03	0.77099E-03
2.500	0.30272E-03	0.27710E-02	0.91640E-04	0.78248E-03
2.700	0.26600E-03	0.28087E-02	0.70756E-04	0.80315E-03
2.900	0.23520E-03	0.28400E-02	0.55317E-04	0.82071E-03
3.100	0.20985E-03	0.28661E-02	0.44037E-04	0.83530E-03
3.300	0.18928E-03	0.28880E-02	0.35828E-04	0.84723E-03
3.500	0.17272E-03	0.29067E-02	0.29834E-04	0.85689E-03

GE K(2)L(8)M(18)4S(2)4P(2) 3P

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.32000E 02	0.34952E-03	0.10240E 04	0.30625E-07
0.025	0.31811E 02	0.25302E 00	0.10120E 04	0.35659E-01
0.050	0.31277E 02	0.92277E 00	0.97828E 03	0.52208E 00
0.075	0.30482E 02	0.18169E 01	0.92914E 03	0.23048E 01
0.100	0.29527E 02	0.27676E 01	0.87184E 03	0.61163E 01
0.125	0.28504E 02	0.36901E 01	0.81248E 03	0.12222E 02
0.150	0.27477E 02	0.45611E 01	0.75501E 03	0.20453E 02
0.175	0.26482E 02	0.53802E 01	0.70131E 03	0.30445E 02
0.200	0.25532E 02	0.61518E 01	0.65187E 03	0.41837E 02
0.225	0.24626E 02	0.68820E 01	0.60644E 03	0.54376E 02
0.250	0.23759E 02	0.75780E 01	0.56447E 03	0.67920E 02
0.275	0.22922E 02	0.82473E 01	0.52542E 03	0.82410E 02
0.300	0.22109E 02	0.88961E 01	0.48882E 03	0.97828E 02
0.325	0.21315E 02	0.95283E 01	0.45433E 03	0.11417E 03
0.350	0.20536E 02	0.10146E 02	0.42173E 03	0.13142E 03
0.375	0.19771E 02	0.10749E 02	0.39091E 03	0.14954E 03
0.400	0.19021E 02	0.11338E 02	0.36179E 03	0.16846E 03
0.425	0.18286E 02	0.11911E 02	0.33436E 03	0.18809E 03
0.450	0.17567E 02	0.12469E 02	0.30860E 03	0.20831E 03
0.475	0.16867E 02	0.13011E 02	0.28451E 03	0.22900E 03
0.500	0.16188E 02	0.13535E 02	0.26207E 03	0.25000E 03
0.550	0.14901E 02	0.14542E 02	0.22704E 03	0.29238E 03
0.600	0.13717E 02	0.15488E 02	0.18815E 03	0.33428E 03
0.650	0.12643E 02	0.16378E 02	0.15984E 03	0.37470E 03
0.700	0.11682E 02	0.17217E 02	0.13646E 03	0.41284E 03
0.750	0.10830E 02	0.18005E 02	0.11730E 03	0.44815E 03
0.800	0.10084E 02	0.18744E 02	0.10168E 03	0.48033E 03
0.850	0.94332E 01	0.19435E 02	0.88985E 02	0.50926E 03
0.900	0.88697E 01	0.20078E 02	0.78671E 02	0.53501E 03
0.950	0.83830E 01	0.20675E 02	0.70275E 02	0.55776E 03
1.000	0.79633E 01	0.21228E 02	0.63414E 02	0.57776E 03
1.100	0.72863E 01	0.22214E 02	0.53091E 02	0.61077E 03
1.200	0.67703E 01	0.23058E 02	0.45837E 02	0.63654E 03
1.300	0.63608E 01	0.23786E 02	0.40459E 02	0.65737E 03
1.400	0.60177E 01	0.24423E 02	0.36213E 02	0.67508E 03
1.500	0.57135E 01	0.24987E 02	0.32645E 02	0.69098E 03
1.600	0.54306E 01	0.25493E 02	0.29491E 02	0.70593E 03
1.700	0.51586E 01	0.25952E 02	0.26612E 02	0.72046E 03
1.800	0.48926E 01	0.26371E 02	0.23938E 02	0.73481E 03
1.900	0.46307E 01	0.26756E 02	0.21444E 02	0.74908E 03
2.000	0.43734E 01	0.27110E 02	0.19127E 02	0.76323E 03
2.100	0.41220E 01	0.27436E 02	0.16991E 02	0.77718E 03
2.200	0.38783E 01	0.27735E 02	0.15041E 02	0.79083E 03
2.300	0.36441E 01	0.28010E 02	0.13280E 02	0.80405E 03
2.400	0.34212E 01	0.28262E 02	0.11704E 02	0.81675E 03
2.500	0.32106E 01	0.28492E 02	0.10308E 02	0.82883E 03
2.700	0.28298E 01	0.28895E 02	0.80076E 01	0.85090E 03
2.900	0.25041E 01	0.29230E 02	0.62707E 01	0.87001E 03
3.100	0.22316E 01	0.29511E 02	0.49801E 01	0.88616E 03
3.300	0.20071E 01	0.29747E 02	0.40285E 01	0.89957E 03
3.500	0.18242E 01	0.29948E 02	0.33276E 01	0.91058E 03

AS K(2)L(8)M(18)4S(2)4P(3) 4S

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.33000E 02	-0.77724E-04	0.10890E 04	0.14918E-08
0.025	0.32813E 02	0.23757E 00	0.10767E 04	0.34868E-01
0.050	0.32280E 02	0.88160E 00	0.10420E 04	0.51889E 00
0.075	0.31470E 02	0.17719E 01	0.99037E 03	0.23402E 01
0.100	0.30478E 02	0.27500E 01	0.92892E 03	0.63597E 01
0.125	0.29395E 02	0.37188E 01	0.86405E 03	0.12997E 02
0.150	0.28293E 02	0.46420E 01	0.80049E 03	0.22157E 02
0.175	0.27220E 02	0.55149E 01	0.74094E 03	0.33406E 02
0.200	0.26201E 02	0.63406E 01	0.68651E 03	0.46221E 02
0.225	0.25244E 02	0.71218E 01	0.63725E 03	0.60160E 02
0.250	0.24344E 02	0.78608E 01	0.59264E 03	0.74924E 02
0.275	0.23494E 02	0.85610E 01	0.55198E 03	0.90360E 02
0.300	0.22684E 02	0.92276E 01	0.51458E 03	0.10641E 03
0.325	0.21906E 02	0.98661E 01	0.47985E 03	0.12309E 03
0.350	0.21150E 02	0.10481E 02	0.44734E 03	0.14041E 03
0.375	0.20414E 02	0.11078E 02	0.41674E 03	0.15841E 03
0.400	0.19693E 02	0.11657E 02	0.38782E 03	0.17707E 03
0.425	0.18986E 02	0.12221E 02	0.36047E 03	0.19639E 03
0.450	0.18292E 02	0.12771E 02	0.33461E 03	0.21631E 03
0.475	0.17613E 02	0.13306E 02	0.31022E 03	0.23675E 03
0.500	0.16949E 02	0.13828E 02	0.28728E 03	0.25762E 03
0.550	0.15674E 02	0.14829E 02	0.24569E 03	0.30017E 03
0.600	0.14481E 02	0.15775E 02	0.20969E 03	0.34297E 03
0.650	0.13379E 02	0.16669E 02	0.17899E 03	0.38500E 03
0.700	0.12375E 02	0.17512E 02	0.15314E 03	0.42539E 03
0.750	0.11472E 02	0.18308E 02	0.13160E 03	0.46346E 03
0.800	0.10668E 02	0.19058E 02	0.11380E 03	0.49872E 03
0.850	0.99585E 01	0.19763E 02	0.99171E 02	0.53091E 03
0.900	0.93369E 01	0.20423E 02	0.87179E 02	0.55994E 03
0.950	0.87953E 01	0.21041E 02	0.77357E 02	0.58587E 03
1.000	0.83249E 01	0.21617E 02	0.69303E 02	0.60886E 03
1.100	0.75627E 01	0.22650E 02	0.57194E 02	0.64706E 03
1.200	0.69844E 01	0.23543E 02	0.48782E 02	0.67681E 03
1.300	0.65340E 01	0.24316E 02	0.42693E 02	0.70045E 03
1.400	0.61677E 01	0.24991E 02	0.38041E 02	0.71997E 03
1.500	0.58538E 01	0.25587E 02	0.34267E 02	0.73692E 03
1.600	0.55704E 01	0.26120E 02	0.31030E 02	0.75238E 03
1.700	0.53038E 01	0.26601E 02	0.28130E 02	0.76708E 03
1.800	0.50460E 01	0.27040E 02	0.25462E 02	0.78143E 03
1.900	0.47932E 01	0.27442E 02	0.22975E 02	0.79562E 03
2.000	0.45442E 01	0.27811E 02	0.20650E 02	0.80973E 03
2.100	0.42995E 01	0.28152E 02	0.18435E 02	0.82372E 03
2.200	0.40603E 01	0.28466E 02	0.16486E 02	0.83751E 03
2.300	0.38284E 01	0.28755E 02	0.14656E 02	0.85098E 03
2.400	0.36053E 01	0.29021E 02	0.12998E 02	0.86405E 03
2.500	0.33925E 01	0.29265E 02	0.11509E 02	0.87661E 03
2.700	0.30018E 01	0.29693E 02	0.90109E 01	0.89989E 03
2.900	0.26614E 01	0.30052E 02	0.70831E 01	0.92043E 03
3.100	0.23715E 01	0.30354E 02	0.56242E 01	0.93810E 03
3.300	0.21291E 01	0.30607E 02	0.45329E 01	0.95301E 03
3.500	0.19289E 01	0.30822E 02	0.37206E 01	0.96541E 03

SE K(2)L(8)M(18)4S(2)4P(4) 3P

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.34000E 02	-0.33045E-03	0.11560E 04	0.27220E-07
0.025	0.33813E 02	0.23198E 00	0.11433E 04	0.35038E-01
0.050	0.33275E 02	0.86833E 00	0.11072E 04	0.52599E 00
0.075	0.32451E 02	0.17635E 01	0.10531E 04	0.23999E 01
0.100	0.31429E 02	0.27650E 01	0.98778E 03	0.66102E 01
0.125	0.30299E 02	0.37700E 01	0.91805E 03	0.13695E 02
0.150	0.29138E 02	0.47347E 01	0.84903E 03	0.23638E 02
0.175	0.27999E 02	0.56510E 01	0.78397E 03	0.36006E 02
0.200	0.26915E 02	0.65219E 01	0.72444E 03	0.50190E 02
0.225	0.25900E 02	0.73491E 01	0.67080E 03	0.65612E 02
0.250	0.24954E 02	0.81323E 01	0.62270E 03	0.81832E 02
0.275	0.24072E 02	0.88712E 01	0.57944E 03	0.98573E 02
0.300	0.23244E 02	0.95678E 01	0.54027E 03	0.11570E 03
0.325	0.22460E 02	0.10226E 02	0.50448E 03	0.13317E 03
0.350	0.21712E 02	0.10852E 02	0.47139E 03	0.15101E 03
0.375	0.20990E 02	0.11451E 02	0.44059E 03	0.16925E 03
0.400	0.20290E 02	0.12027E 02	0.41170E 03	0.18795E 03
0.425	0.19607E 02	0.12585E 02	0.38445E 03	0.20715E 03
0.450	0.18939E 02	0.13126E 02	0.35868E 03	0.22583E 03
0.475	0.18284E 02	0.13654E 02	0.33429E 03	0.24701E 03
0.500	0.17641E 02	0.14168E 02	0.31120E 03	0.26762E 03
0.550	0.16396E 02	0.15157E 02	0.26884E 03	0.30989E 03
0.600	0.15214E 02	0.16098E 02	0.23146E 03	0.35292E 03
0.650	0.14104E 02	0.16990E 02	0.19891E 03	0.39587E 03
0.700	0.13075E 02	0.17836E 02	0.17096E 03	0.43785E 03
0.750	0.12134E 02	0.18636E 02	0.14724E 03	0.47811E 03
0.800	0.11283E 02	0.19393E 02	0.12732E 03	0.51604E 03
0.850	0.10522E 02	0.20108E 02	0.11071E 03	0.55122E 03
0.900	0.98461E 01	0.20781E 02	0.96946E 02	0.58341E 03
0.950	0.92507E 01	0.21413E 02	0.85575E 02	0.61253E 03
1.000	0.87288E 01	0.22007E 02	0.76192E 02	0.63863E 03
1.100	0.78756E 01	0.23081E 02	0.62029E 02	0.68247E 03
1.200	0.72266E 01	0.24017E 02	0.52224E 02	0.71681E 03
1.300	0.67258E 01	0.24833E 02	0.45236E 02	0.74388E 03
1.400	0.63273E 01	0.25546E 02	0.40035E 02	0.76578E 03
1.500	0.59960E 01	0.26176E 02	0.35951E 02	0.78423E 03
1.600	0.57061E 01	0.26736E 02	0.32560E 02	0.80054E 03
1.700	0.54406E 01	0.27241E 02	0.29600E 02	0.81564E 03
1.800	0.51884E 01	0.27700E 02	0.26919E 02	0.83011E 03
1.900	0.49434E 01	0.28120E 02	0.24437E 02	0.84429E 03
2.000	0.47026E 01	0.28506E 02	0.22115E 02	0.85834E 03
2.100	0.44654E 01	0.28861E 02	0.19939E 02	0.87229E 03
2.200	0.42322E 01	0.29189E 02	0.17911E 02	0.88612E 03
2.300	0.40042E 01	0.29492E 02	0.16034E 02	0.89975E 03
2.400	0.37830E 01	0.29771E 02	0.14311E 02	0.91307E 03
2.500	0.35700E 01	0.30029E 02	0.12745E 02	0.92598E 03
2.700	0.31734E 01	0.30483E 02	0.10070E 02	0.95028E 03
2.900	0.28214E 01	0.30866E 02	0.79601E 01	0.97211E 03
3.100	0.25164E 01	0.31188E 02	0.63322E 01	0.99122E 03
3.300	0.22573E 01	0.31460E 02	0.50953E 01	0.10076E 04
3.500	0.20404E 01	0.31691E 02	0.41634E 01	0.10214E 04

BR K(2)L(8)M(18)4S(2)4P(5) 2P

F			S			F**2			(N-F)**2		
0.000	0.35000E	02	0.15688E	-03		0.12250E	04		0.61902E	-08	
0.025	0.34815E	02	0.22408E	00		0.12121E	04		0.34168E	-01	
0.050	0.34282E	02	0.84396E	00		0.11175E	04		0.51578E	00	
0.075	0.33457E	02	0.17321E	01		0.11194E	04		0.23798E	01	
0.100	0.32422E	02	0.27466E	01		0.10512E	04		0.66481E	01	
0.125	0.31260E	02	0.37827E	01		0.97718E	03		0.13989E	02	
0.150	0.30048E	02	0.47875E	01		0.90290E	03		0.24519E	02	
0.175	0.28846E	02	0.57464E	01		0.83210E	03		0.37870E	02	
0.200	0.27692E	02	0.66603E	01		0.76686E	03		0.53404E	02	
0.225	0.26608E	02	0.75320E	01		0.70798E	03		0.70426E	02	
0.250	0.25601E	02	0.83608E	01		0.65540E	03		0.88345E	02	
0.275	0.24669E	02	0.91445E	01		0.60855E	03		0.10673E	03	
0.300	0.23805E	02	0.98820E	01		0.56667E	03		0.12533E	03	
0.325	0.22999E	02	0.10575E	02		0.52895E	03		0.14403E	03	
0.350	0.22241E	02	0.11226E	02		0.49465E	03		0.16280E	03	
0.375	0.21521E	02	0.11841E	02		0.46314E	03		0.18169E	03	
0.400	0.20831E	02	0.12425E	02		0.43392E	03		0.20077E	03	
0.425	0.20164E	02	0.12985E	02		0.40659E	03		0.22010E	03	
0.450	0.19516E	02	0.13523E	02		0.38087E	03		0.23976E	03	
0.475	0.18883E	02	0.14045E	02		0.35655E	03		0.25977E	03	
0.500	0.18262E	02	0.14552E	02		0.33351E	03		0.28015E	03	
0.550	0.17057E	02	0.15527E	02		0.29094E	03		0.32195E	03	
0.600	0.15901E	02	0.16457E	02		0.25283E	03		0.36479E	03	
0.650	0.14800E	02	0.17343E	02		0.21905E	03		0.40803E	03	
0.700	0.13765E	02	0.18187E	02		0.18947E	03		0.45093E	03	
0.750	0.12803E	02	0.18989E	02		0.16390E	03		0.49273E	03	
0.800	0.11918E	02	0.19749E	02		0.14205E	03		0.53276E	03	
0.850	0.11115E	02	0.20470E	02		0.12354E	03		0.57050E	03	
0.900	0.10392E	02	0.21152E	02		0.10799E	03		0.60556E	03	
0.950	0.97467E	01	0.21796E	02		0.94998E	02		0.63773E	03	
1.000	0.91748E	01	0.22403E	02		0.84177E	02		0.66694E	03	
1.100	0.82280E	01	0.23511E	02		0.67700E	02		0.71674E	03	
1.200	0.75003E	01	0.24485E	02		0.56254E	02		0.75624E	03	
1.300	0.69396E	01	0.25339E	02		0.48158E	02		0.78739E	03	
1.400	0.64997E	01	0.26090E	02		0.42246E	02		0.81227E	03	
1.500	0.61428E	01	0.26752E	02		0.37734E	02		0.83274E	03	
1.600	0.58401E	01	0.27342E	02		0.34107E	02		0.85030E	03	
1.700	0.55709E	01	0.27872E	02		0.31035E	02		0.86607E	03	
1.800	0.53213E	01	0.28352E	02		0.28316E	02		0.88082E	03	
1.900	0.50825E	01	0.28790E	02		0.25832E	02		0.89506E	03	
2.000	0.48495E	01	0.29193E	02		0.23518E	02		0.90905E	03	
2.100	0.46202E	01	0.29564E	02		0.21346E	02		0.92293E	03	
2.200	0.43940E	01	0.29906E	02		0.19307E	02		0.93673E	03	
2.300	0.41716E	01	0.30223E	02		0.17402E	02		0.95039E	03	
2.400	0.39540E	01	0.30515E	02		0.15634E	02		0.96385E	03	
2.500	0.37427E	01	0.30786E	02		0.14008E	02		0.97702E	03	
2.700	0.33439E	01	0.31265E	02		0.11182E	02		0.10021E	04	
2.900	0.29835E	01	0.31671E	02		0.89011E	01		0.10251E	04	
3.100	0.26658E	01	0.32015E	02		0.71065E	01		0.10455E	04	
3.300	0.23917E	01	0.32307E	02		0.57201E	01		0.10633E	04	
3.500	0.21590E	01	0.32554E	02		0.46612E	01		0.10785E	04	

KR K(2)L(8)M(18)4S(2)4P(6) 1S

F

S

F**2

(N-F)**2

0.000	0.36000E 02	-0.27418E-03	0.12960E 04	0.16598E-07
0.025	0.35820E 02	0.21354E 00	0.12830E 04	0.32530E-01
0.050	0.35296E 02	0.81164E 00	0.12458E 04	0.49542E 00
0.075	0.34480E 02	0.16845E 01	0.11888E 04	0.23118E 01
0.100	0.33441E 02	0.27033E 01	0.11183E 04	0.65482E 01
0.125	0.32260E 02	0.37641E 01	0.10407E 04	0.13991E 02
0.150	0.31009E 02	0.48059E 01	0.96159E 03	0.24905E 02
0.175	0.29752E 02	0.58056E 01	0.88518E 03	0.39037E 02
0.200	0.28532E 02	0.67606E 01	0.81406E 03	0.55774E 02
0.225	0.27377E 02	0.76737E 01	0.74949E 03	0.74359E 02
0.250	0.26301E 02	0.85457E 01	0.69173E 03	0.94074E 02
0.275	0.25307E 02	0.93743E 01	0.64045E 03	0.11434E 03
0.300	0.24392E 02	0.10157E 02	0.59496E 03	0.13475E 03
0.325	0.23547E 02	0.10891E 02	0.55446E 03	0.15508E 03
0.350	0.22763E 02	0.11579E 02	0.51814E 03	0.17523E 03
0.375	0.22028E 02	0.12223E 02	0.48525E 03	0.19520E 03
0.400	0.21335E 02	0.12828E 02	0.45517E 03	0.21507E 03
0.425	0.20673E 02	0.13400E 02	0.42739E 03	0.23491E 03
0.450	0.20037E 02	0.13944E 02	0.40148E 03	0.25482E 03
0.475	0.19420E 02	0.14466E 02	0.37715E 03	0.27488E 03
0.500	0.18820E 02	0.14970E 02	0.35418E 03	0.29516E 03
0.550	0.17656E 02	0.15933E 02	0.31172E 03	0.33652E 03
0.600	0.16535E 02	0.16849E 02	0.27339E 03	0.37890E 03
0.650	0.15458E 02	0.17725E 02	0.23894E 03	0.42199E 03
0.700	0.14431E 02	0.18563E 02	0.20825E 03	0.46523E 03
0.750	0.13462E 02	0.19363E 02	0.18122E 03	0.50797E 03
0.800	0.12556E 02	0.20125E 02	0.15771E 03	0.54952E 03
0.850	0.11724E 02	0.20850E 02	0.13746E 03	0.58931E 03
0.900	0.10963E 02	0.21538E 02	0.12019E 03	0.62685E 03
0.950	0.10274E 02	0.22190E 02	0.10556E 03	0.66180E 03
1.000	0.96566E 01	0.22808E 02	0.93250E 02	0.69397E 03
1.100	0.86182E 01	0.23942E 02	0.74273E 02	0.74977E 03
1.200	0.78083E 01	0.24948E 02	0.60969E 02	0.79477E 03
1.300	0.71808E 01	0.25838E 02	0.51564E 02	0.83054E 03
1.400	0.66912E 01	0.26623E 02	0.44772E 02	0.85900E 03
1.500	0.63006E 01	0.27318E 02	0.39698E 02	0.88205E 03
1.600	0.59779E 01	0.27938E 02	0.35735E 02	0.90133E 03
1.700	0.56993E 01	0.28493E 02	0.32482E 02	0.91814E 03
1.800	0.54479E 01	0.28996E 02	0.29679E 02	0.93343E 03
1.900	0.52123E 01	0.29453E 02	0.27168E 02	0.94788E 03
2.000	0.49855E 01	0.29873E 02	0.24856E 02	0.96190E 03
2.100	0.47636E 01	0.30259E 02	0.22692E 02	0.97571E 03
2.200	0.45448E 01	0.30616E 02	0.20655E 02	0.98943E 03
2.300	0.43289E 01	0.30946E 02	0.18739E 02	0.10031E 04
2.400	0.41164E 01	0.31252E 02	0.16945E 02	0.10166E 04
2.500	0.39085E 01	0.31535E 02	0.15276E 02	0.10299E 04
2.700	0.35111E 01	0.32040E 02	0.12326E 02	0.10555E 04
2.900	0.31456E 01	0.32469E 02	0.98946E 01	0.10794E 04
3.100	0.28180E 01	0.32835E 02	0.79410E 01	0.11010E 04
3.300	0.25308E 01	0.33146E 02	0.64049E 01	0.11202E 04
3.500	0.22835E 01	0.33410E 02	0.52145E 01	0.11368E 04

Appendix 2

LI+ 1S(2) 1S

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.20000E 01	0.20000E 01	0.30845E-04	0.39999E 01	0.77115E-05
0.19918E 01	0.19918E 01	0.82136E-02	0.39836E 01	0.20619E-02
0.19675E 01	0.19675E 01	0.32503E-01	0.39350E 01	0.82601E-02
0.19279E 01	0.19279E 01	0.72139E-01	0.38557E 01	0.18710E-01
0.18741E 01	0.18741E 01	0.12591E 00	0.37482E 01	0.33592E-01
0.18078E 01	0.18078E 01	0.19222E 00	0.36156E 01	0.53165E-01
0.17308E 01	0.17308E 01	0.26920E 00	0.34616E 01	0.77767E-01
0.16452E 01	0.16452E 01	0.35479E 00	0.32904E 01	0.10782E 00
0.15531E 01	0.15531E 01	0.44686E 00	0.31063E 01	0.14386E 00
0.14567E 01	0.14567E 01	0.54330E 00	0.29134E 01	0.18648E 00
0.13579E 01	0.13579E 01	0.64212E 00	0.27158E 01	0.23644E 00
0.12585E 01	0.12585E 01	0.74148E 00	0.25170E 01	0.29458E 00
0.11602E 01	0.11602E 01	0.83978E 00	0.23204E 01	0.36191E 00
0.10643E 01	0.10643E 01	0.93566E 00	0.21287E 01	0.43955E 00
0.97198E 00	0.97198E 00	0.10280E 01	0.19440E 01	0.52882E 00
0.88399E 00	0.88399E 00	0.11160E 01	0.17680E 01	0.63123E 00
0.80098E 00	0.80098E 00	0.11990E 01	0.16020E 01	0.74847E 00
0.72334E 00	0.72334E 00	0.12767E 01	0.14467E 01	0.88248E 00
0.65128E 00	0.65128E 00	0.13487E 01	0.13026E 01	0.10354E 01
0.58485E 00	0.58485E 00	0.14151E 01	0.11697E 01	0.12098E 01
0.52399E 00	0.52399E 00	0.14760E 01	0.10480E 01	0.14084E 01
0.41820E 00	0.41820E 00	0.15818E 01	0.83639E 00	0.18912E 01
0.33182E 00	0.33182E 00	0.16682E 01	0.66364E 00	0.25137E 01
0.26224E 00	0.26224E 00	0.17378E 01	0.52449E 00	0.33132E 01
0.20676E 00	0.20676E 00	0.17932E 01	0.41352E 00	0.43365E 01
0.16284E 00	0.16284E 00	0.18372E 01	0.32569E 00	0.56409E 01
0.12825E 00	0.12825E 00	0.18717E 01	0.25650E 00	0.72972E 01
0.10109E 00	0.10109E 00	0.18989E 01	0.20219E 00	0.93917E 01
0.79812E-01	0.79812E-01	0.19202E 01	0.15962E 00	0.12029E 02
0.63141E-01	0.63141E-01	0.19369E 01	0.12628E 00	0.15338E 02
0.50078E-01	0.50078E-01	0.19499E 01	0.10016E 00	0.19469E 02
0.31779E-01	0.31779E-01	0.19682E 01	0.63558E-01	0.30967E 02
0.20431E-01	0.20431E-01	0.19796E 01	0.40862E-01	0.48445E 02
0.13319E-01	0.13319E-01	0.19867E 01	0.26638E-01	0.74580E 02
0.88070E-02	0.88070E-02	0.19912E 01	0.17614E-01	0.11305E 03
0.59063E-02	0.59063E-02	0.19941E 01	0.11813E-01	0.16881E 03
0.40162E-02	0.40162E-02	0.19960E 01	0.80324E-02	0.24849E 03
0.27678E-02	0.27678E-02	0.19972E 01	0.55356E-02	0.36080E 03
0.19322E-02	0.19322E-02	0.19981E 01	0.38644E-02	0.51704E 03
0.13656E-02	0.13656E-02	0.19986E 01	0.27312E-02	0.73177E 03
0.97659E-03	0.97659E-03	0.19990E 01	0.19532E-02	0.10235E 04
0.70625E-03	0.70625E-03	0.19993E 01	0.14125E-02	0.14154E 04
0.51620E-03	0.51620E-03	0.19995E 01	0.10324E-02	0.19367E 04
0.38113E-03	0.38113E-03	0.19996E 01	0.76225E-03	0.26233E 04
0.28410E-03	0.28410E-03	0.19997E 01	0.56821E-03	0.35193E 04
0.21371E-03	0.21371E-03	0.19998E 01	0.42743E-03	0.46787E 04
0.12405E-03	0.12405E-03	0.19999E 01	0.24810E-03	0.80608E 04
0.74280E-04	0.74280E-04	0.19999E 01	0.14856E-03	0.13462E 05
0.45747E-04	0.45747E-04	0.20000E 01	0.91495E-04	0.21859E 05
0.28902E-04	0.28902E-04	0.20000E 01	0.57803E-04	0.34600E 05
0.18686E-04	0.18686E-04	0.20000E 01	0.37372E-04	0.53515E 05

BE+ 1S(2)2S(1) 2S

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.30000E 01	0.30000E 01	-0.14931E-04	0.90000E 01	-0.16590E-05
0.29411E 01	0.29411E 01	0.58888E-01	0.88219E 01	0.66752E-02
0.27820E 01	0.27820E 01	0.21799E 00	0.83252E 01	0.26184E-01
0.25661E 01	0.25662E 01	0.43378E 00	0.76075E 01	0.57020E-01
0.23418E 01	0.23422E 01	0.65785E 00	0.67893E 01	0.96895E-01
0.21437E 01	0.21445E 01	0.85545E 00	0.59774E 01	0.14312E 00
0.19860E 01	0.19875E 01	0.10125E 01	0.52432E 01	0.19310E 00
0.18660E 01	0.18686E 01	0.11314E 01	0.46207E 01	0.24484E 00
0.17732E 01	0.17773E 01	0.12227E 01	0.41146E 01	0.29717E 00
0.16960E 01	0.17018E 01	0.12982E 01	0.37127E 01	0.34965E 00
0.16257E 01	0.16335E 01	0.13665E 01	0.33955E 01	0.40244E 00
0.15570E 01	0.15671E 01	0.14329E 01	0.31426E 01	0.45596E 00
0.14876E 01	0.15000E 01	0.15000E 01	0.29363E 01	0.51087E 00
0.14168E 01	0.14315E 01	0.15685E 01	0.27619E 01	0.56790E 00
0.13450E 01	0.13619E 01	0.16381E 01	0.26087E 01	0.62794E 00
0.12729E 01	0.12918E 01	0.17082E 01	0.24689E 01	0.69190E 00
0.12010E 01	0.12217E 01	0.17783E 01	0.23375E 01	0.76077E 00
0.11301E 01	0.11523E 01	0.18477E 01	0.22113E 01	0.83556E 00
0.10606E 01	0.10840E 01	0.19160E 01	0.20887E 01	0.91731E 00
0.99307E 00	0.10173E 01	0.19827E 01	0.19688E 01	0.10071E 01
0.92774E 00	0.95255E 00	0.20474E 01	0.18514E 01	0.11059E 01
0.80477E 00	0.82978E 00	0.21702E 01	0.16253E 01	0.13352E 01
0.69306E 00	0.71728E 00	0.22827E 01	0.14136E 01	0.16149E 01
0.59316E 00	0.61588E 00	0.23841E 01	0.12192E 01	0.19555E 01
0.50500E 00	0.52578E 00	0.24742E 01	0.10442E 01	0.23695E 01
0.42809E 00	0.44671E 00	0.25533E 01	0.88913E 00	0.28717E 01
0.36163E 00	0.37806E 00	0.26219E 01	0.75363E 00	0.34791E 01
0.30466E 00	0.31898E 00	0.26810E 01	0.63651E 00	0.42121E 01
0.25616E 00	0.26850E 00	0.27315E 01	0.53616E 00	0.50945E 01
0.21507E 00	0.22564E 00	0.27744E 01	0.45079E 00	0.61545E 01
0.18042E 00	0.18942E 00	0.28106E 01	0.37854E 00	0.74248E 01
0.12687E 00	0.13333E 00	0.28667E 01	0.26652E 00	0.10756E 02
0.89342E-01	0.93935E-01	0.29061E 01	0.18780E 00	0.15474E 02
0.63146E-01	0.66407E-01	0.29336E 01	0.13277E 00	0.22096E 02
0.44866E-01	0.47185E-01	0.29528E 01	0.94335E-01	0.31301E 02
0.32080E-01	0.33736E-01	0.29663E 01	0.67446E-01	0.43980E 02
0.23100E-01	0.24290E-01	0.29757E 01	0.48559E-01	0.61280E 02
0.16759E-01	0.17619E-01	0.29824E 01	0.35223E-01	0.84672E 02
0.12253E-01	0.12879E-01	0.29871E 01	0.25747E-01	0.11602E 03
0.90282E-02	0.94881E-02	0.29905E 01	0.18967E-01	0.15767E 03
0.67042E-02	0.70444E-02	0.29930E 01	0.14082E-01	0.21254E 03
0.50167E-02	0.52704E-02	0.29947E 01	0.10536E-01	0.28425E 03
0.37824E-02	0.39730E-02	0.29960E 01	0.79419E-02	0.37724E 03
0.28727E-02	0.30170E-02	0.29970E 01	0.60309E-02	0.49694E 03
0.21974E-02	0.23075E-02	0.29977E 01	0.46125E-02	0.64991E 03
0.16925E-02	0.17770E-02	0.29982E 01	0.35521E-02	0.84407E 03
0.10241E-02	0.10750E-02	0.29989E 01	0.21487E-02	0.13957E 04
0.63520E-03	0.66660E-03	0.29993E 01	0.13325E-02	0.22510E 04
0.40313E-03	0.42298E-03	0.29996E 01	0.84550E-03	0.35477E 04
0.26134E-03	0.27416E-03	0.29997E 01	0.54802E-03	0.54738E 04
0.17278E-03	0.18123E-03	0.29998E 01	0.36225E-03	0.82810E 04

B+ 1S(2)2S(2) 1S

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.40001E 01	0.40001E 01	-0.68247E-04	0.16000E 02	-0.42654E-05
0.39281E 01	0.39281E 01	0.71891E-01	0.15711E 02	0.45757E-02
0.37269E 01	0.37269E 01	0.27313E 00	0.14890E 02	0.18343E-01
0.34349E 01	0.34350E 01	0.56501E 00	0.13661E 02	0.41359E-01
0.31018E 01	0.31021E 01	0.89792E 00	0.12189E 02	0.73666E-01
0.27736E 01	0.27742E 01	0.12258E 01	0.10641E 02	0.11519E 00
0.24825E 01	0.24838E 01	0.15162E 01	0.91526E 01	0.16566E 00
0.22443E 01	0.22465E 01	0.17535E 01	0.73122E 01	0.22446E 00
0.20601E 01	0.20636E 01	0.19364E 01	0.66637E 01	0.29059E 00
0.19223E 01	0.19274E 01	0.20726E 01	0.57152E 01	0.36264E 00
0.18192E 01	0.18265E 01	0.21735E 01	0.49523E 01	0.43889E 00
0.17394E 01	0.17493E 01	0.22507E 01	0.43496E 01	0.51745E 00
0.16737E 01	0.16864E 01	0.23136E 01	0.38783E 01	0.59654E 00
0.16152E 01	0.16312E 01	0.23688E 01	0.35110E 01	0.67469E 00
0.15598E 01	0.15793E 01	0.24207E 01	0.32237E 01	0.75093E 00
0.15052E 01	0.15282E 01	0.24718E 01	0.29966E 01	0.82486E 00
0.14501E 01	0.14768E 01	0.25232E 01	0.28141E 01	0.89662E 00
0.13944E 01	0.14247E 01	0.25753E 01	0.26638E 01	0.96676E 00
0.13381E 01	0.13719E 01	0.26281E 01	0.25364E 01	0.10361E 01
0.12815E 01	0.13186E 01	0.26814E 01	0.24249E 01	0.11058E 01
0.12250E 01	0.12652E 01	0.27348E 01	0.23242E 01	0.11767E 01
0.11135E 01	0.11587E 01	0.28413E 01	0.21413E 01	0.13269E 01
0.10059E 01	0.10545E 01	0.29455E 01	0.19705E 01	0.14948E 01
0.90359E 00	0.95414E 00	0.30459E 01	0.18047E 01	0.16878E 01
0.80770E 00	0.85864E 00	0.31414E 01	0.16426E 01	0.19125E 01
0.71877E 00	0.76881E 00	0.32312E 01	0.14852E 01	0.21756E 01
0.63710E 00	0.68523E 00	0.33148E 01	0.13344E 01	0.24841E 01
0.56271E 00	0.60819E 00	0.33918E 01	0.11920E 01	0.28454E 01
0.49548E 00	0.53782E 00	0.34622E 01	0.10594E 01	0.32679E 01
0.43512E 00	0.47405E 00	0.35260E 01	0.93749E 00	0.37611E 01
0.38125E 00	0.41667E 00	0.35833E 01	0.82651E 00	0.43355E 01
0.29113E 00	0.31976E 00	0.36802E 01	0.63686E 00	0.57788E 01
0.22123E 00	0.24383E 00	0.37562E 01	0.48674E 00	0.77170E 01
0.16766E 00	0.18522E 00	0.38148E 01	0.37022E 00	0.10304E 02
0.12696E 00	0.14047E 00	0.38595E 01	0.28096E 00	0.13737E 02
0.96193E-01	0.10653E 00	0.38935E 01	0.21316E 00	0.18266E 02
0.73012E-01	0.80905E-01	0.39191E 01	0.16190E 00	0.24206E 02
0.55565E-01	0.61587E-01	0.39384E 01	0.12325E 00	0.31954E 02
0.42429E-01	0.47030E-01	0.39530E 01	0.94117E-01	0.42001E 02
0.32523E-01	0.36047E-01	0.39640E 01	0.72135E-01	0.54952E 02
0.25035E-01	0.27743E-01	0.39723E 01	0.55515E-01	0.71553E 02
0.19358E-01	0.21447E-01	0.39786E 01	0.42914E-01	0.92710E 02
0.15038E-01	0.16656E-01	0.39833E 01	0.33327E-01	0.11952E 03
0.11738E-01	0.12998E-01	0.39870E 01	0.26005E-01	0.15332E 03
0.92062E-02	0.10191E-01	0.39898E 01	0.20389E-01	0.19568E 03
0.72554E-02	0.80294E-02	0.39920E 01	0.16063E-01	0.24851E 03
0.45715E-02	0.50563E-02	0.39949E 01	0.10115E-01	0.39496E 03
0.29347E-02	0.32443E-02	0.39968E 01	0.64897E-02	0.61586E 03
0.19181E-02	0.21194E-02	0.39979E 01	0.42394E-02	0.94302E 03
0.12753E-02	0.14086E-02	0.39986E 01	0.28174E-02	0.14192E 04
0.86177E-03	0.95148E-03	0.39990E 01	0.19031E-02	0.21013E 04

C+ 1S(2)2S(2)2P(1) 2P

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.50000E 01	0.50000E 01	0.35226E-04	0.25000E 02	0.14091E-05
0.49267E 01	0.49396E 01	0.60419E-01	0.24632E 02	0.24529E-02
0.47181E 01	0.47667E 01	0.23333E 00	0.23575E 02	0.98976E-02
0.44051E 01	0.45038E 01	0.49623E 00	0.21951E 02	0.22606E-01
0.40295E 01	0.41821E 01	0.81791E 00	0.19936E 02	0.41026E-01
0.36344E 01	0.38345E 01	0.11655E 01	0.17721E 02	0.65765E-01
0.32558E 01	0.34898E 01	0.15102E 01	0.15430E 02	0.97553E-01
0.29178E 01	0.31689E 01	0.18311E 01	0.13347E 02	0.13719E 00
0.26321E 01	0.28840E 01	0.21160E 01	0.11413E 02	0.18541E 00
0.24003E 01	0.26399E 01	0.23601E 01	0.97227E 01	0.24274E 00
0.22174E 01	0.24356E 01	0.25644E 01	0.82888E 01	0.30938E 00
0.20745E 01	0.22668E 01	0.27331E 01	0.70986E 01	0.38503E 00
0.19625E 01	0.21278E 01	0.28722E 01	0.61268E 01	0.46879E 00
0.18725E 01	0.20125E 01	0.29875E 01	0.53420E 01	0.55924E 00
0.17975E 01	0.19154E 01	0.30846E 01	0.47128E 01	0.65450E 00
0.17323E 01	0.18319E 01	0.31681E 01	0.42098E 01	0.75254E 00
0.16729E 01	0.17584E 01	0.32416E 01	0.38077E 01	0.85133E 00
0.16170E 01	0.16919E 01	0.33081E 01	0.34851E 01	0.94919E 00
0.15631E 01	0.16307E 01	0.33693E 01	0.32246E 01	0.10449E 01
0.15102E 01	0.15731E 01	0.34269E 01	0.30122E 01	0.11377E 01
0.14580E 01	0.15181E 01	0.34818E 01	0.28369E 01	0.12274E 01
0.13551E 01	0.14139E 01	0.35861E 01	0.25639E 01	0.13987E 01
0.12545E 01	0.13147E 01	0.36853E 01	0.23565E 01	0.15639E 01
0.11570E 01	0.12193E 01	0.37807E 01	0.21853E 01	0.17301E 01
0.10632E 01	0.11274E 01	0.38726E 01	0.20332E 01	0.19046E 01
0.97377E 00	0.10389E 01	0.39611E 01	0.18914E 01	0.20942E 01
0.88908E 00	0.95419E 00	0.40458E 01	0.17554E 01	0.23048E 01
0.80937E 00	0.87342E 00	0.41266E 01	0.16235E 01	0.25413E 01
0.73476E 00	0.79690E 00	0.42031E 01	0.14956E 01	0.28104E 01
0.66531E 00	0.72486E 00	0.42751E 01	0.13722E 01	0.31156E 01
0.60100E 00	0.65745E 00	0.43425E 01	0.12540E 01	0.34630E 01
0.48736E 00	0.53672E 00	0.44633E 01	0.10362E 01	0.43073E 01
0.39246E 00	0.43442E 00	0.45656E 01	0.84609E 00	0.53961E 01
0.31436E 00	0.34928E 00	0.46507E 01	0.68456E 00	0.67938E 01
0.25083E 00	0.27946E 00	0.47205E 01	0.55017E 00	0.85802E 01
0.19963E 00	0.22284E 00	0.47772E 01	0.44012E 00	0.10854E 02
0.15866E 00	0.17733E 00	0.48227E 01	0.35107E 00	0.13737E 02
0.12604E 00	0.14098E 00	0.48590E 01	0.27951E 00	0.17378E 02
0.10017E 00	0.11209E 00	0.48879E 01	0.22260E 00	0.21958E 02
0.79688E-01	0.89189E-01	0.49108E 01	0.17730E 00	0.27698E 02
0.63495E-01	0.71065E-01	0.49289E 01	0.14138E 00	0.34863E 02
0.50696E-01	0.56731E-01	0.49433E 01	0.11293E 00	0.43772E 02
0.40573E-01	0.45391E-01	0.49546E 01	0.90405E-01	0.54805E 02
0.32558E-01	0.36412E-01	0.49636E 01	0.72552E-01	0.68414E 02
0.26201E-01	0.29292E-01	0.49707E 01	0.58385E-01	0.85137E 02
0.21149E-01	0.23635E-01	0.49764E 01	0.47123E-01	0.10560E 03
0.13911E-01	0.15534E-01	0.49845E 01	0.30985E-01	0.16087E 03
0.92705E-02	0.10344E-01	0.49896E 01	0.20640E-01	0.24175E 03
0.62601E-02	0.69796E-02	0.49930E 01	0.13931E-01	0.35841E 03
0.42830E-02	0.47718E-02	0.49952E 01	0.95267E-02	0.52434E 03
0.29679E-02	0.33046E-02	0.49967E 01	0.65936E-02	0.75723E 03

N+ 1S(2)2S(2)2P(2) 3P

S(F(I,1))**2		S(F(I,J))**2		Z-F	(SF(I,1))**2		INC/COH
0.59999E 01	01	0.59999E 01	01	0.38505E-04	0.36000E 02	0.10696E-05	
0.59293E 01	01	0.59479E 01	01	0.52082E-01	0.35575E 02	0.14640E-02	
0.57257E 01	01	0.57969E 01	01	0.20310E 00	0.34341E 02	0.59143E-02	
0.54126E 01	01	0.55612E 01	01	0.43882E 00	0.32412E 02	0.13539E-01	
0.50230E 01	01	0.52614E 01	01	0.73853E 00	0.29955E 02	0.24655E-01	
0.45938E 01	01	0.49212E 01	01	0.10788E 01	0.27160E 02	0.39720E-01	
0.41592E 01	01	0.45630E 01	01	0.14369E 01	0.24220E 02	0.59329E-01	
0.37454E 01	01	0.42064E 01	01	0.17936E 01	0.21298E 02	0.84214E-01	
0.33737E 01	01	0.38659E 01	01	0.21341E 01	0.18523E 02	0.11522E 00	
0.30506E 01	01	0.35510E 01	01	0.24489E 01	0.15981E 02	0.15324E 00	
0.27790E 01	01	0.32671E 01	01	0.27329E 01	0.13721E 02	0.19917E 00	
0.25558E 01	01	0.30155E 01	01	0.29844E 01	0.11756E 02	0.25382E 00	
0.23749E 01	01	0.27956E 01	01	0.32044E 01	0.10085E 02	0.31774E 00	
0.22287E 01	01	0.26048E 01	01	0.33952E 01	0.66792E 01	0.39119E 00	
0.21099E 01	01	0.24399E 01	01	0.35601E 01	0.75113E 01	0.47397E 00	
0.20117E 01	01	0.22973E 01	01	0.37026E 01	0.65484E 01	0.56542E 00	
0.19287E 01	01	0.21737E 01	01	0.38262E 01	0.57587E 01	0.66443E 00	
0.18565E 01	01	0.20659E 01	01	0.39341E 01	0.51127E 01	0.76948E 00	
0.17918E 01	01	0.19710E 01	01	0.40290E 01	0.45845E 01	0.87884E 00	
0.17323E 01	01	0.18866E 01	01	0.41134E 01	0.41521E 01	0.99068E 00	
0.16763E 01	01	0.18107E 01	01	0.41893E 01	0.37971E 01	0.11033E 01	
0.15710E 01	01	0.16782E 01	01	0.43217E 01	0.32611E 01	0.13253E 01	
0.14712E 01	01	0.15638E 01	01	0.44362E 01	0.28859E 01	0.15372E 01	
0.13755E 01	01	0.14611E 01	01	0.45388E 01	0.26125E 01	0.17373E 01	
0.12833E 01	01	0.13664E 01	01	0.46335E 01	0.24029E 01	0.19283E 01	
0.11949E 01	01	0.12775E 01	01	0.47225E 01	0.22327E 01	0.21152E 01	
0.11103E 01	01	0.11929E 01	01	0.48071E 01	0.20867E 01	0.23037E 01	
0.10297E 01	01	0.11120E 01	01	0.48879E 01	0.19553E 01	0.24998E 01	
0.95301E 00	00	0.10346E 01	01	0.49654E 01	0.18331E 01	0.27087E 01	
0.88037E 00	00	0.96050E 00	00	0.50395E 01	0.17169E 01	0.29353E 01	
0.81174E 00	00	0.88971E 00	00	0.51103E 01	0.16050E 01	0.31840E 01	
0.68645E 00	00	0.75841E 00	00	0.52416E 01	0.13925E 01	0.37643E 01	
0.57671E 00	00	0.64122E 00	00	0.53588E 01	0.11954E 01	0.44828E 01	
0.48175E 00	00	0.53827E 00	00	0.54617E 01	0.10161E 01	0.53750E 01	
0.40049E 00	00	0.44912E 00	00	0.55509E 01	0.85642E 00	0.64815E 01	
0.33165E 00	00	0.37292E 00	00	0.56271E 01	0.71680E 00	0.78502E 01	
0.27381E 00	00	0.30848E 00	00	0.56915E 01	0.59669E 00	0.95385E 01	
0.22557E 00	00	0.25446E 00	00	0.57455E 01	0.49467E 00	0.11515E 02	
0.18556E 00	00	0.20949E 00	00	0.57905E 01	0.40889E 00	0.14152E 02	
0.15252E 00	00	0.17227E 00	00	0.58277E 01	0.33732E 00	0.17276E 02	
0.12534E 00	00	0.14159E 00	00	0.58584E 01	0.27797E 00	0.21075E 02	
0.10303E 00	00	0.11638E 00	00	0.58836E 01	0.22897E 00	0.25696E 02	
0.84746E-01	-01	0.95705E-01	-01	0.59043E 01	0.18863E 00	0.31301E 02	
0.69780E-01	-01	0.78777E-01	-01	0.59212E 01	0.15550E 00	0.38079E 02	
0.57532E-01	-01	0.64923E-01	-01	0.59351E 01	0.12831E 00	0.46255E 02	
0.47509E-01	-01	0.53587E-01	-01	0.59464E 01	0.10602E 00	0.56087E 02	
0.32574E-01	-01	0.36704E-01	-01	0.59633E 01	0.72744E-01	0.81976E 02	
0.22520E-01	-01	0.25348E-01	-01	0.59746E 01	0.50302E-01	0.11877E 03	
0.15709E-01	-01	0.17663E-01	-01	0.59823E 01	0.35083E-01	0.17049E 03	
0.11061E-01	-01	0.12425E-01	-01	0.59876E 01	0.24703E-01	0.24238E 03	
0.78638E-02	-02	0.88251E-02	-02	0.59912E 01	0.17558E-01	0.34122E 03	

O+ 1S(2)2S(2)2P(3) 4S

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2		INC/COH
0.70000E 01	01	0.70000E 01	01	-0.22233E-04	0.49000E 02	02	-0.45372E-06
0.69331E 01	01	0.69542E 01	01	0.45821E-01	0.48531E 02	02	0.94417E-03
0.67386E 01	01	0.68201E 01	01	0.17994E 00	0.47159E 02	02	0.38156E-02
0.64341E 01	01	0.66073E 01	01	0.39265E 00	0.44986E 02	02	0.87283E-02
0.60458E 01	01	0.63305E 01	01	0.66952E 00	0.42165E 02	02	0.15878E-01
0.56040E 01	01	0.60066E 01	01	0.99343E 00	0.38880E 02	02	0.25552E-01
0.51389E 01	01	0.56532E 01	01	0.13468E 01	0.35321E 02	02	0.38129E-01
0.46773E 01	01	0.52868E 01	01	0.17132E 01	0.31658E 02	02	0.54097E-01
0.42400E 01	01	0.49212E 01	01	0.20788E 01	0.28075E 02	02	0.74044E-01
0.38412E 01	01	0.45671E 01	01	0.24329E 01	0.24660E 02	02	0.98658E-01
0.34886E 01	01	0.42321E 01	01	0.27679E 01	0.21505E 02	02	0.12871E 00
0.31843E 01	01	0.39210E 01	01	0.30790E 01	0.18658E 02	02	0.16502E 00
0.29266E 01	01	0.36362E 01	01	0.33638E 01	0.16138E 02	02	0.20843E 00
0.27111E 01	01	0.33784E 01	01	0.36216E 01	0.13944E 02	02	0.25973E 00
0.25321E 01	01	0.31470E 01	01	0.38530E 01	0.12057E 02	02	0.31957E 00
0.23836E 01	01	0.29406E 01	01	0.40594E 01	0.10450E 02	02	0.38845E 00
0.22595E 01	01	0.27571E 01	01	0.42429E 01	0.90941E 01	01	0.46656E 00
0.21547E 01	01	0.25944E 01	01	0.44056E 01	0.79553E 01	01	0.55380E 00
0.20648E 01	01	0.24501E 01	01	0.45499E 01	0.70029E 01	01	0.64972E 00
0.19861E 01	01	0.23221E 01	01	0.46779E 01	0.62082E 01	01	0.75351E 00
0.19158E 01	01	0.22082E 01	01	0.47918E 01	0.55457E 01	01	0.86406E 00
0.17925E 01	01	0.20152E 01	01	0.49848E 01	0.45317E 01	01	0.11000E 01
0.16833E 01	01	0.18579E 01	01	0.51421E 01	0.38208E 01	01	0.13458E 01
0.15827E 01	01	0.17261E 01	01	0.52739E 01	0.33148E 01	01	0.15910E 01
0.14879E 01	01	0.16124E 01	01	0.53876E 01	0.29465E 01	01	0.18285E 01
0.13978E 01	01	0.15115E 01	01	0.54885E 01	0.26706E 01	01	0.20552E 01
0.13118E 01	01	0.14197E 01	01	0.55803E 01	0.24564E 01	01	0.22717E 01
0.12298E 01	01	0.13346E 01	01	0.56654E 01	0.22834E 01	01	0.24811E 01
0.11516E 01	01	0.12546E 01	01	0.57454E 01	0.21377E 01	01	0.26876E 01
0.10772E 01	01	0.11787E 01	01	0.58213E 01	0.20101E 01	01	0.28960E 01
0.10063E 01	01	0.11063E 01	01	0.58937E 01	0.18946E 01	01	0.31109E 01
0.87515E 00	00	0.97052E 00	00	0.60295E 01	0.16855E 01	01	0.35773E 01
0.75737E 00	00	0.84624E 00	00	0.61538E 01	0.14943E 01	01	0.41183E 01
0.65234E 00	00	0.73330E 00	00	0.62667E 01	0.13161E 01	01	0.47616E 01
0.55939E 00	00	0.63177E 00	00	0.62682E 01	0.11506E 01	01	0.55346E 01
0.47777E 00	00	0.54150E 00	00	0.64585E 01	0.99884E 00	00	0.64660E 01
0.40665E 00	00	0.46208E 00	00	0.65379E 01	0.86160E 00	00	0.75881E 01
0.34510E 00	00	0.39285E 00	00	0.66071E 01	0.73921E 00	00	0.89381E 01
0.29218E 00	00	0.33301E 00	00	0.66670E 01	0.63140E 00	00	0.10559E 02
0.24692E 00	00	0.28163E 00	00	0.67184E 01	0.53740E 00	00	0.12502E 02
0.20839E 00	00	0.23777E 00	00	0.67622E 01	0.45615E 00	00	0.14824E 02
0.17572E 00	00	0.20050E 00	00	0.67995E 01	0.38641E 00	00	0.17597E 02
0.14310E 00	00	0.16896E 00	00	0.68310E 01	0.32687E 00	00	0.20898E 02
0.12480E 00	00	0.14233E 00	00	0.68577E 01	0.27627E 00	00	0.24822E 02
0.10519E 00	00	0.11991E 00	00	0.68801E 01	0.23341E 00	00	0.29476E 02
0.88702E-01	00	0.10106E 00	00	0.68989E 01	0.19720E 00	00	0.34985E 02
0.63220E-01	00	0.71939E-01	00	0.69281E 01	0.14093E 00	00	0.49159E 02
0.45255E-01	00	0.51425E-01	00	0.69486E 01	0.10105E 00	00	0.68761E 02
0.32572E-01	00	0.36961E-01	00	0.69630E 01	0.72807E-01	01	0.95637E 02
0.23590E-01	00	0.26732E-01	00	0.69733E 01	0.52760E-01	01	0.13217E 03
0.17201E-01	00	0.19466E-01	00	0.69805E 01	0.38480E-01	01	0.18141E 03

F+ 1S(2)2S(2)2P(4) 3P

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2		INC/COH
0.79999E 01	0.79999E 01	0.79999E 01	0.79999E 01	0.61572E-04	0.63999E 02	0.95207E-05	
0.79352E 01	0.79574E 01	0.79574E 01	0.79574E 01	0.42584E-01	0.63481E 02	0.67081E-03	
0.77461E 01	0.78325E 01	0.78325E 01	0.78325E 01	0.16748E 00	0.61959E 02	0.27031E-02	
0.74472E 01	0.76329E 01	0.76329E 01	0.76329E 01	0.36713E 00	0.59530E 02	0.61671E-02	
0.70601E 01	0.73599E 01	0.73599E 01	0.73599E 01	0.63005E 00	0.56340E 02	0.11133E-01	
0.66109E 01	0.70576E 01	0.70576E 01	0.70576E 01	0.94238E 00	0.52568E 02	0.17927E-01	
0.61266E 01	0.67105E 01	0.67105E 01	0.67105E 01	0.12895E 01	0.48409E 02	0.26638E-01	
0.56322E 01	0.63426E 01	0.63426E 01	0.63426E 01	0.16574E 01	0.44050E 02	0.37626E-01	
0.51491E 01	0.59663E 01	0.59663E 01	0.59663E 01	0.20337E 01	0.39662E 02	0.51276E-01	
0.46933E 01	0.55919E 01	0.55919E 01	0.55919E 01	0.24080E 01	0.35386E 02	0.56051E-01	
0.42756E 01	0.52275E 01	0.52275E 01	0.52275E 01	0.27725E 01	0.31330E 02	0.88494E-01	
0.39019E 01	0.48787E 01	0.48787E 01	0.48787E 01	0.31213E 01	0.27569E 02	0.11322E 00	
0.35738E 01	0.45495E 01	0.45495E 01	0.45495E 01	0.34505E 01	0.24147E 02	0.14290E 00	
0.32900E 01	0.42422E 01	0.42422E 01	0.42422E 01	0.37578E 01	0.21083E 02	0.17824E 00	
0.30473E 01	0.39580E 01	0.39580E 01	0.39580E 01	0.40420E 01	0.18375E 02	0.21997E 00	
0.28411E 01	0.36971E 01	0.36971E 01	0.36971E 01	0.43029E 01	0.16009E 02	0.26878E 00	
0.26664E 01	0.34590E 01	0.34590E 01	0.34590E 01	0.45410E 01	0.13959E 02	0.32530E 00	
0.25181E 01	0.32428E 01	0.32428E 01	0.32428E 01	0.47572E 01	0.12197E 02	0.39004E 00	
0.23916E 01	0.30472E 01	0.30472E 01	0.30472E 01	0.49528E 01	0.10689E 02	0.46334E 00	
0.22829E 01	0.28708E 01	0.28708E 01	0.28708E 01	0.51292E 01	0.94053E 01	0.54535E 00	
0.21882E 01	0.27120E 01	0.27120E 01	0.27120E 01	0.52880E 01	0.83148E 01	0.63597E 00	
0.20301E 01	0.24407E 01	0.24407E 01	0.24407E 01	0.55593E 01	0.66068E 01	0.84144E 00	
0.18997E 01	0.22207E 01	0.22207E 01	0.22207E 01	0.57793E 01	0.53800E 01	0.10742E 01	
0.17865E 01	0.20406E 01	0.20406E 01	0.20406E 01	0.59594E 01	0.44947E 01	0.13259E 01	
0.16843E 01	0.18909E 01	0.18909E 01	0.18909E 01	0.61091E 01	0.38494E 01	0.15870E 01	
0.15895E 01	0.17641E 01	0.17641E 01	0.17641E 01	0.62359E 01	0.33724E 01	0.18491E 01	
0.15005E 01	0.16540E 01	0.16540E 01	0.16540E 01	0.63459E 01	0.30135E 01	0.21058E 01	
0.14161E 01	0.15565E 01	0.15565E 01	0.15565E 01	0.64435E 01	0.27374E 01	0.23539E 01	
0.13359E 01	0.14681E 01	0.14681E 01	0.14681E 01	0.65318E 01	0.25195E 01	0.25925E 01	
0.12595E 01	0.13867E 01	0.13867E 01	0.13867E 01	0.66133E 01	0.23424E 01	0.28233E 01	
0.11868E 01	0.13106E 01	0.13106E 01	0.13106E 01	0.66894E 01	0.21941E 01	0.30488E 01	
0.10514E 01	0.11702E 01	0.11702E 01	0.11702E 01	0.68298E 01	0.19523E 01	0.34984E 01	
0.92866E 00	0.10419E 01	0.10419E 01	0.10419E 01	0.69581E 01	0.17523E 01	0.39709E 01	
0.81750E 00	0.92385E 00	0.92385E 00	0.92385E 00	0.70761E 01	0.15745E 01	0.44941E 01	
0.71720E 00	0.81535E 00	0.81535E 00	0.81535E 00	0.71846E 01	0.14108E 01	0.50926E 01	
0.62709E 00	0.71625E 00	0.71625E 00	0.71625E 00	0.72837E 01	0.12581E 01	0.57894E 01	
0.54655E 00	0.62648E 00	0.62648E 00	0.62648E 00	0.73735E 01	0.11160E 01	0.65073E 01	
0.47497E 00	0.54583E 00	0.54583E 00	0.54583E 00	0.74512E 01	0.98468E 00	0.75701E 01	
0.41168E 00	0.47396E 00	0.47396E 00	0.47396E 00	0.75260E 01	0.86463E 00	0.87043E 01	
0.35603E 00	0.41036E 00	0.41036E 00	0.41036E 00	0.75896E 01	0.75596E 00	0.10039E 02	
0.30732E 00	0.35444E 00	0.35444E 00	0.35444E 00	0.76455E 01	0.65857E 00	0.11509E 02	
0.26486E 00	0.30556E 00	0.30556E 00	0.30556E 00	0.76944E 01	0.57197E 00	0.13453E 02	
0.22800E 00	0.26302E 00	0.26302E 00	0.26302E 00	0.77370E 01	0.49553E 00	0.15514E 02	
0.19609E 00	0.22616E 00	0.22616E 00	0.22616E 00	0.77738E 01	0.42847E 00	0.18143E 02	
0.16855E 00	0.19431E 00	0.19431E 00	0.19431E 00	0.78057E 01	0.36994E 00	0.21100E 02	
0.14484E 00	0.16687E 00	0.16687E 00	0.16687E 00	0.78331E 01	0.31906E 00	0.24550E 02	
0.10695E 00	0.12303E 00	0.12303E 00	0.12303E 00	0.78770E 01	0.23692E 00	0.33247E 02	
0.79072E-01	0.90817E-01	0.90817E-01	0.90817E-01	0.79092E 01	0.17566E 00	0.44975E 02	
0.58615E-01	0.67205E-01	0.67205E-01	0.67205E-01	0.79328E 01	0.13071E 00	0.60588E 02	
0.43608E-01	0.49912E-01	0.49912E-01	0.49912E-01	0.79501E 01	0.97427E-01	0.81501E 02	
0.32584E-01	0.37232E-01	0.37232E-01	0.37232E-01	0.79628E 01	0.72888E-01	0.10925E 03	

NE+ 1S(2)2S(2)2P(5) 2P

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2	INC/CON
0.90000E 01	01	0.90000E 01	01	0.27418E-05	0.81000E 02	0.33850E-07
0.89381E 01	01	0.89605E 01	01	0.39464E-01	0.80442E 02	0.49059E-03
0.87566E 01	01	0.88442E 01	01	0.15575E 00	0.78801E 02	0.19765E-02
0.84672E 01	01	0.86572E 01	01	0.34282E 00	0.76163E 02	0.45012E-02
0.80879E 01	01	0.84035E 01	01	0.59149E 00	0.72667E 02	0.81398E-02
0.76407E 01	01	0.81095E 01	01	0.89046E 00	0.68481E 02	0.13003E-01
0.71491E 01	01	0.77725E 01	01	0.12275E 01	0.63796E 02	0.19241E-01
0.66361E 01	01	0.74094E 01	01	0.15906E 01	0.58802E 02	0.27050E-01
0.61220E 01	01	0.70314E 01	01	0.19686E 01	0.53676E 02	0.36676E-01
0.56238E 01	01	0.66480E 01	01	0.23520E 01	0.48577E 02	0.48419E-01
0.51540E 01	01	0.62670E 01	01	0.27329E 01	0.43632E 02	0.62637E-01
0.47211E 01	01	0.58947E 01	01	0.31052E 01	0.38939E 02	0.79747E-01
0.43295E 01	01	0.55356E 01	01	0.34644E 01	0.34567E 02	0.10022E 00
0.39810E 01	01	0.51929E 01	01	0.38071E 01	0.30558E 02	0.12459E 00
0.36745E 01	01	0.48687E 01	01	0.41312E 01	0.26929E 02	0.15341E 00
0.34075E 01	01	0.45644E 01	01	0.44356E 01	0.23683E 02	0.18729E 00
0.31764E 01	01	0.42805E 01	01	0.47195E 01	0.20805E 02	0.22684E 00
0.29771E 01	01	0.40171E 01	01	0.49829E 01	0.18275E 02	0.27267E 00
0.28053E 01	01	0.37738E 01	01	0.52261E 01	0.16064E 02	0.32533E 00
0.26570E 01	01	0.35502E 01	01	0.54498E 01	0.14143E 02	0.38532E 00
0.25284E 01	01	0.33452E 01	01	0.56548E 01	0.12481E 02	0.45307E 00
0.23173E 01	01	0.29871E 01	01	0.60129E 01	0.98126E 01	0.61277E 00
0.21503E 01	01	0.26903E 01	01	0.63096E 01	0.78401E 01	0.80479E 00
0.20125E 01	01	0.24451E 01	01	0.65548E 01	0.63846E 01	0.10267E 01
0.18938E 01	01	0.22421E 01	01	0.67579E 01	0.53076E 01	0.12733E 01
0.17880E 01	01	0.20726E 01	01	0.69274E 01	0.45055E 01	0.15375E 01
0.16912E 01	01	0.19295E 01	01	0.70704E 01	0.39023E 01	0.18118E 01
0.16012E 01	01	0.18068E 01	01	0.71931E 01	0.34436E 01	0.20889E 01
0.15166E 01	01	0.16998E 01	01	0.73002E 01	0.30892E 01	0.23631E 01
0.14366E 01	01	0.16046E 01	01	0.73954E 01	0.28109E 01	0.26309E 01
0.13607E 01	01	0.15186E 01	01	0.74814E 01	0.25881E 01	0.28907E 01
0.12198E 01	01	0.13659E 01	01	0.76341E 01	0.22530E 01	0.33884E 01
0.10920E 01	01	0.12309E 01	01	0.77691E 01	0.20072E 01	0.38706E 01
0.97568E 00	00	0.11080E 01	01	0.78920E 01	0.18098E 01	0.43607E 01
0.86991E 00	00	0.99479E 00	00	0.80052E 01	0.16396E 01	0.48825E 01
0.77378E 00	00	0.89009E 00	00	0.81099E 01	0.14857E 01	0.54585E 01
0.68658E 00	00	0.79351E 00	00	0.82065E 01	0.13433E 01	0.61090E 01
0.60770E 00	00	0.70488E 00	00	0.82951E 01	0.12104E 01	0.68534E 01
0.53662E 00	00	0.62407E 00	00	0.83759E 01	0.10862E 01	0.77109E 01
0.47281E 00	00	0.55085E 00	00	0.84491E 01	0.97094E 00	0.87020E 01
0.41576E 00	00	0.48492E 00	00	0.85151E 01	0.86460E 00	0.98485E 01
0.36494E 00	00	0.42591E 00	00	0.85741E 01	0.76727E 00	0.11175E 02
0.31985E 00	00	0.37334E 00	00	0.86266E 01	0.67883E 00	0.12708E 02
0.27997E 00	00	0.32674E 00	00	0.86732E 01	0.59903E 00	0.14479E 02
0.24481E 00	00	0.28558E 00	00	0.87144E 01	0.52744E 00	0.16522E 02
0.21389E 00	00	0.24936E 00	00	0.87503E 01	0.46357E 00	0.18877E 02
0.16302E 00	00	0.18974E 00	00	0.88102E 01	0.35665E 00	0.24702E 02
0.12414E 00	00	0.14420E 00	00	0.88556E 01	0.27347E 00	0.32383E 02
0.94575E-01	01	0.10963E 00	00	0.88904E 01	0.20940E 00	0.42457E 02
0.72161E-01	01	0.63466E-01	01	0.89165E 01	0.16036E 00	0.55603E 02
0.55188E-01	01	0.63701E-01	01	0.89363E 01	0.12298E 00	0.72667E 02

NA+ 1S(2) 2S(2) 2P(6) 1S

S(F(I,I))*2 S(F(I,J))*2 Z-F (SF(I,1))*2 INC/CDH

0.10000E 02	0.10000E 02	-0.14067E-03	0.10000E 03	-0.14066E-05
0.99414E 01	0.99635E 01	0.36537E-01	0.99413E 02	0.36753E-03
0.97684E 01	0.98551E 01	0.14490E 00	0.97677E 02	0.14834E-01
0.94908E 01	0.96799E 01	0.32011E 00	0.94872E 02	0.33741E-02
0.91233E 01	0.94453E 01	0.55472E 00	0.91124E 02	0.60876E-02
0.86843E 01	0.91605E 01	0.83946E 00	0.86591E 02	0.95945E-02
0.81941E 01	0.88359E 01	0.11641E 01	0.81454E 02	0.14291E-01
0.76732E 01	0.84818E 01	0.15182E 01	0.75898E 02	0.20004E-01
0.71406E 01	0.81079E 01	0.18921E 01	0.70105E 02	0.26990E-01
0.66128E 01	0.77230E 01	0.22770E 01	0.64239E 02	0.35446E-01
0.61034E 01	0.73346E 01	0.26654E 01	0.58444E 02	0.45605E-01
0.56224E 01	0.69489E 01	0.30511E 01	0.52837E 02	0.57746E-01
0.51765E 01	0.65706E 01	0.34294E 01	0.47507E 02	0.72187E-01
0.47697E 01	0.62035E 01	0.37965E 01	0.42517E 02	0.89294E-01
0.44031E 01	0.58502E 01	0.41498E 01	0.37907E 02	0.10947E 00
0.40764E 01	0.55127E 01	0.44873E 01	0.33697E 02	0.13317E 00
0.37875E 01	0.51923E 01	0.48077E 01	0.29888E 02	0.16086E 00
0.35336E 01	0.48897E 01	0.51103E 01	0.26472E 02	0.19304E 00
0.33113E 01	0.46055E 01	0.53945E 01	0.23429E 02	0.23025E 00
0.31171E 01	0.43396E 01	0.56604E 01	0.20736E 02	0.27298E 00
0.29474E 01	0.40918E 01	0.59082E 01	0.18363E 02	0.32174E 00
0.26683E 01	0.36489E 01	0.63511E 01	0.14461E 02	0.43919E 00
0.24503E 01	0.32715E 01	0.67285E 01	0.11491E 02	0.58557E 00
0.22753E 01	0.29527E 01	0.70473E 01	0.92436E 01	0.76240E 00
0.21300E 01	0.26847E 01	0.73153E 01	0.75473E 01	0.96926E 00
0.20051E 01	0.24596E 01	0.75404E 01	0.62647E 01	0.12036E 01
0.18946E 01	0.22701E 01	0.77299E 01	0.52907E 01	0.14610E 01
0.17945E 01	0.21095E 01	0.78905E 01	0.45461E 01	0.17356E 01
0.17022E 01	0.19720E 01	0.80280E 01	0.39720E 01	0.20211E 01
0.16161E 01	0.18529E 01	0.81471E 01	0.35247E 01	0.23114E 01
0.15351E 01	0.17483E 01	0.82517E 01	0.31720E 01	0.26014E 01
0.13860E 01	0.15705E 01	0.84295E 01	0.26616E 01	0.31671E 01
0.12515E 01	0.14210E 01	0.85790E 01	0.23147E 01	0.37052E 01
0.11294E 01	0.12897E 01	0.87103E 01	0.20614E 01	0.42254E 01
0.10182E 01	0.11707E 01	0.88293E 01	0.18622E 01	0.47412E 01
0.91677E 00	0.10611E 01	0.89389E 01	0.16949E 01	0.52739E 01
0.82417E 00	0.95957E 00	0.90404E 01	0.15472E 01	0.58432E 01
0.73964E 00	0.86531E 00	0.91347E 01	0.14123E 01	0.64677E 01
0.66257E 00	0.77804E 00	0.92220E 01	0.12871E 01	0.71648E 01
0.59245E 00	0.69760E 00	0.93024E 01	0.11700E 01	0.79510E 01
0.52880E 00	0.62382E 00	0.93762E 01	0.10603E 01	0.88433E 01
0.47118E 00	0.55651E 00	0.94435E 01	0.95785E 00	0.96591E 01
0.41920E 00	0.49539E 00	0.95046E 01	0.86272E 00	0.11017E 02
0.37242E 00	0.44015E 00	0.95598E 01	0.77486E 00	0.12338E 02
0.33045E 00	0.39044E 00	0.96096E 01	0.69418E 00	0.13843E 02
0.29290E 00	0.34588E 00	0.96541E 01	0.62050E 00	0.15559E 02
0.22953E 00	0.27058E 00	0.97294E 01	0.49301E 00	0.19735E 02
0.17947E 00	0.21109E 00	0.97889E 01	0.38955E 00	0.25129E 02
0.14017E 00	0.16445E 00	0.98355E 01	0.30668E 00	0.32071E 02
0.10947E 00	0.12810E 00	0.98719E 01	0.24097E 00	0.40967E 02
0.85564E-01	0.99867E-01	0.99001E 01	0.18922E 00	0.52321E 02

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2		INC/CON
0.99999E 01	0.99999E 01	0.72479E-04	0.99999E 02	0.72450E-05			
0.99567E 01	0.99735E 01	0.26462E-01	0.99560E 02	0.26577E-03			
0.98286E 01	0.98952E 01	0.10482E 00	0.98282E 02	0.10555E-02			
0.96207E 01	0.97672E 01	0.23278E 00	0.96180E 02	0.24201E-02			
0.93412E 01	0.95934E 01	0.40559E 00	0.93353E 02	0.43554E-02			
0.90004E 01	0.93786E 01	0.62137E 00	0.89866E 02	0.64144E-02			
0.86104E 01	0.91285E 01	0.87147E 00	0.85830E 02	0.10153E-01			
0.81839E 01	0.88492E 01	0.11506E 01	0.81359E 02	0.14144E-01			
0.77338E 01	0.85469E 01	0.14531E 01	0.76571E 02	0.18977E-01			
0.72725E 01	0.82277E 01	0.17723E 01	0.71580E 02	0.24759E-01			
0.68110E 01	0.78972E 01	0.21028E 01	0.66495E 02	0.31523E-01			
0.63588E 01	0.75606E 01	0.24394E 01	0.61413E 02	0.39721E-01			
0.59237E 01	0.72224E 01	0.27776E 01	0.56419E 02	0.49232E-01			
0.55116E 01	0.68863E 01	0.31137E 01	0.51585E 02	0.60363E-01			
0.51265E 01	0.65555E 01	0.34445E 01	0.46962E 02	0.73346E-01			
0.47709E 01	0.62327E 01	0.37673E 01	0.42595E 02	0.88442E-01			
0.44460E 01	0.59199E 01	0.40801E 01	0.38512E 02	0.10594E 00			
0.41516E 01	0.56186E 01	0.43814E 01	0.34728E 02	0.12615E 00			
0.38868E 01	0.53299E 01	0.46751E 01	0.31250E 02	0.14944E 00			
0.36498E 01	0.50546E 01	0.49454E 01	0.28075E 02	0.17515E 00			
0.34387E 01	0.47933E 01	0.52057E 01	0.25195E 02	0.20555E 00			
0.30846E 01	0.43132E 01	0.56868E 01	0.20264E 02	0.28064E 00			
0.28051E 01	0.38894E 01	0.61106E 01	0.16319E 02	0.37445E 00			
0.25823E 01	0.35191E 01	0.64809E 01	0.13203E 02	0.49036E 00			
0.24014E 01	0.31983E 01	0.68017E 01	0.10762E 02	0.63198E 00			
0.22507E 01	0.29220E 01	0.70780E 01	0.88506E 01	0.75880E 00			
0.21214E 01	0.26847E 01	0.73153E 01	0.73817E 01	0.99101E 00			
0.20076E 01	0.24610E 01	0.75190E 01	0.62303E 01	0.12060E 01			
0.19049E 01	0.23057E 01	0.76943E 01	0.53315E 01	0.14432E 01			
0.18107E 01	0.21542E 01	0.78458E 01	0.46265E 01	0.16955E 01			
0.17230E 01	0.20224E 01	0.79776E 01	0.40700E 01	0.19501E 01			
0.15628E 01	0.18037E 01	0.81963E 01	0.32722E 01	0.25043E 01			
0.14189E 01	0.16277E 01	0.83723E 01	0.27479E 01	0.30458E 01			
0.12885E 01	0.14795E 01	0.85205E 01	0.23866E 01	0.35702E 01			
0.11679E 01	0.13499E 01	0.86501E 01	0.21232E 01	0.40742E 01			
0.10618E 01	0.12332E 01	0.87668E 01	0.19191E 01	0.45561E 01			
0.96303E 00	0.11261E 01	0.88739E 01	0.17515E 01	0.50861E 01			
0.87267E 00	0.10270E 01	0.89730E 01	0.16070E 01	0.55537E 01			
0.78993E 00	0.93469E 00	0.90553E 01	0.14775E 01	0.61363E 01			
0.71417E 00	0.84882E 00	0.91512E 01	0.13561E 01	0.67352E 01			
0.64482E 00	0.76956E 00	0.92309E 01	0.12469E 01	0.74032E 01			
0.58143E 00	0.69523E 00	0.93048E 01	0.11425E 01	0.81444E 01			
0.52357E 00	0.62716E 00	0.93726E 01	0.10443E 01	0.89752E 01			
0.47066E 00	0.56464E 00	0.94354E 01	0.95215E 00	0.99094E 01			
0.42294E 00	0.50745E 00	0.94925E 01	0.86599E 00	0.10951E 02			
0.37948E 00	0.45535E 00	0.95447E 01	0.78575E 00	0.12147E 02			
0.30462E 00	0.36520E 00	0.95348E 01	0.64279E 00	0.14969E 02			
0.24378E 00	0.29174E 00	0.97083E 01	0.52214E 00	0.18593E 02			
0.19463E 00	0.23244E 00	0.97676E 01	0.42169E 00	0.23152E 02			
0.15529E 00	0.18493E 00	0.98151E 01	0.33967E 00	0.28901E 02			
0.12383E 00	0.14705E 00	0.98529E 01	0.27274E 00	0.36125E 02			

S(F(1,1))**2		S(F(1,J))**2		Z-F	(SF(1,1))**2		INC/COH
0.11000E 02	02	0.11000E 02	02	-0.21541E-03	0.12100E 03	03	-0.17802E-05
0.10874E 02	02	0.10892E 02	02	0.10842E 00	0.11959E 03	03	0.90654E-03
0.10535E 02	02	0.10605E 02	02	0.39490E 00	0.11565E 03	03	0.34146E-02
0.10076E 02	02	0.10230E 02	02	0.77007E 00	0.10989E 03	03	0.70078E-02
0.95832E 01	01	0.98473E 01	01	0.11527E 01	0.10315E 03	03	0.11175E-01
0.91018E 01	01	0.94957E 01	01	0.15043E 01	0.96146E 02	02	0.15646E-01
0.86375E 01	01	0.91740E 01	01	0.18260E 01	0.89323E 02	02	0.20442E-01
0.81801E 01	01	0.88652E 01	01	0.21348E 01	0.82876E 02	02	0.25759E-01
0.77204E 01	01	0.85537E 01	01	0.24463E 01	0.76834E 02	02	0.31838E-01
0.72572E 01	01	0.82324E 01	01	0.27676E 01	0.71152E 02	02	0.38897E-01
0.67955E 01	01	0.79013E 01	01	0.30987E 01	0.65764E 02	02	0.47118E-01
0.63431E 01	01	0.75642E 01	01	0.34358E 01	0.60623E 02	02	0.56674E-01
0.59077E 01	01	0.72257E 01	01	0.37743E 01	0.55703E 02	02	0.67757E-01
0.54955E 01	01	0.68901E 01	01	0.41099E 01	0.51000E 02	02	0.80586E-01
0.51108E 01	01	0.65605E 01	01	0.44395E 01	0.46525E 02	02	0.95421E-01
0.47560E 01	01	0.62396E 01	01	0.47604E 01	0.42294E 02	02	0.11255E 00
0.44321E 01	01	0.59289E 01	01	0.50711E 01	0.38325E 02	02	0.13232E 00
0.41390E 01	01	0.56298E 01	01	0.53702E 01	0.34631E 02	02	0.15507E 00
0.38755E 01	01	0.53432E 01	01	0.56568E 01	0.31219E 02	02	0.18120E 00
0.36398E 01	01	0.50696E 01	01	0.59304E 01	0.28091E 02	02	0.21111E 00
0.34298E 01	01	0.48095E 01	01	0.61905E 01	0.25242E 02	02	0.24525E 00
0.30775E 01	01	0.43304E 01	01	0.66696E 01	0.20339E 02	02	0.32792E 00
0.27993E 01	01	0.39059E 01	01	0.70941E 01	0.16396E 02	02	0.43267E 00
0.25774E 01	01	0.35340E 01	01	0.74660E 01	0.13270E 02	02	0.56264E 00
0.23972E 01	01	0.32110E 01	01	0.77890E 01	0.10815E 02	02	0.72020E 00
0.22469E 01	01	0.29324E 01	01	0.80676E 01	0.88989E 01	01	0.90659E 00
0.21182E 01	01	0.26929E 01	01	0.83071E 01	0.74070E 01	01	0.11215E 01
0.20047E 01	01	0.24873E 01	01	0.85127E 01	0.62452E 01	01	0.13631E 01
0.19025E 01	01	0.23104E 01	01	0.86896E 01	0.53384E 01	01	0.16277E 01
0.18085E 01	01	0.21576E 01	01	0.88424E 01	0.46276E 01	01	0.19108E 01
0.17211E 01	01	0.20247E 01	01	0.89753E 01	0.40672E 01	01	0.22068E 01
0.15614E 01	01	0.18047E 01	01	0.91953E 01	0.32654E 01	01	0.28160E 01
0.14177E 01	01	0.16280E 01	01	0.93720E 01	0.27405E 01	01	0.34198E 01
0.12875E 01	01	0.14796E 01	01	0.95204E 01	0.23803E 01	01	0.39996E 01
0.11691E 01	01	0.13500E 01	01	0.96500E 01	0.21187E 01	01	0.45546E 01
0.10611E 01	01	0.12335E 01	01	0.97665E 01	0.19167E 01	01	0.50956E 01
0.96249E 00	00	0.11266E 01	01	0.98734E 01	0.17508E 01	01	0.56392E 01
0.87226E 00	00	0.10277E 01	01	0.99723E 01	0.16076E 01	01	0.62034E 01
0.78963E 00	00	0.93559E 00	00	0.10064E 02	0.14789E 01	01	0.68054E 01
0.71396E 00	00	0.84985E 00	00	0.10150E 02	0.13603E 01	01	0.74616E 01
0.64469E 00	00	0.77019E 00	00	0.10230E 02	0.12495E 01	01	0.81869E 01
0.58135E 00	00	0.69642E 00	00	0.10304E 02	0.11453E 01	01	0.89962E 01
0.52354E 00	00	0.62837E 00	00	0.10372E 02	0.10472E 01	01	0.99040E 01
0.47087E 00	00	0.56585E 00	00	0.10434E 02	0.95503E 00	00	0.10925E 02
0.42298E 00	00	0.50864E 00	00	0.10491E 02	0.86875E 00	00	0.12076E 02
0.37954E 00	00	0.45649E 00	00	0.10544E 02	0.78836E 00	00	0.13374E 02
0.30469E 00	00	0.36623E 00	00	0.10634E 02	0.64504E 00	00	0.16486E 02
0.24386E 00	00	0.29264E 00	00	0.10707E 02	0.52403E 00	00	0.20433E 02
0.19476E 00	00	0.23320E 00	00	0.10767E 02	0.42345E 00	00	0.25426E 02
0.15536E 00	00	0.18556E 00	00	0.10814E 02	0.34089E 00	00	0.31724E 02
0.12388E 00	00	0.14757E 00	00	0.10852E 02	0.27378E 00	00	0.39639E 02

K K(2)L(8)3S(2)3P(6) 1S

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(S(F(I,I))*2	INC/COB
0.18000E 02	0.18000E 02	0.64373E-04	0.32400E 03	0.19888E-06
0.17822E 02	0.17392E 02	0.13826E 00	0.32079E 03	0.33748E-03
0.17313E 02	0.17579E 02	0.42059E 00	0.31144E 03	0.13505E-02
0.16537E 02	0.17097E 02	0.90349E 00	0.29576E 03	0.30443E-02
0.15587E 02	0.16490E 02	0.15103E 01	0.27302E 03	0.54324E-02
0.14561E 02	0.15809E 02	0.21915E 01	0.25056E 03	0.85417E-02
0.13546E 02	0.15097E 02	0.29032E 01	0.23380E 03	0.12417E-01
0.12602E 02	0.14387E 02	0.35125E 01	0.21090E 03	0.17123E-01
0.11766E 02	0.13702E 02	0.42952E 01	0.18905E 03	0.22735E-01
0.11047E 02	0.13051E 02	0.49488E 01	0.16871E 03	0.29333E-01
0.10439E 02	0.12440E 02	0.55598E 01	0.15055E 03	0.35978E-01
0.99220E 01	0.11870E 02	0.61302E 01	0.13414E 03	0.45701E-01
0.94759E 01	0.11339E 02	0.66606E 01	0.12005E 03	0.55453E-01
0.90800E 01	0.10843E 02	0.71521E 01	0.10795E 03	0.66247E-01
0.87176E 01	0.10394E 02	0.76051E 01	0.97685E 02	0.77854E-01
0.83763E 01	0.99760E 01	0.80240E 01	0.88994E 02	0.90183E-01
0.80485E 01	0.95925E 01	0.84075E 01	0.81661E 02	0.10295E 00
0.77298E 01	0.92412E 01	0.87588E 01	0.75476E 02	0.11606E 00
0.74184E 01	0.89192E 01	0.90588E 01	0.70223E 02	0.12931E 00
0.71144E 01	0.86237E 01	0.93763E 01	0.65748E 02	0.14251E 00
0.68184E 01	0.83514E 01	0.96486E 01	0.61697E 02	0.15558E 00
0.62552E 01	0.78635E 01	0.10137E 02	0.55587E 02	0.18235E 00
0.57369E 01	0.74320E 01	0.10568E 02	0.50529E 02	0.20915E 00
0.52676E 01	0.70385E 01	0.10962E 02	0.46222E 02	0.23715E 00
0.48474E 01	0.66704E 01	0.11330E 02	0.42360E 02	0.26746E 00
0.44738E 01	0.63204E 01	0.11680E 02	0.38709E 02	0.30126E 00
0.41429E 01	0.59850E 01	0.12015E 02	0.35366E 02	0.33973E 00
0.38507E 01	0.56628E 01	0.12337E 02	0.32122E 02	0.38407E 00
0.35930E 01	0.53539E 01	0.12648E 02	0.29038E 02	0.43550E 00
0.33682E 01	0.50590E 01	0.12941E 02	0.26130E 02	0.49525E 00
0.31666E 01	0.47766E 01	0.13221E 02	0.23415E 02	0.56464E 00
0.28357E 01	0.42634E 01	0.13737E 02	0.18617E 02	0.73766E 00
0.25763E 01	0.38100E 01	0.14190E 02	0.14532E 02	0.96650E 00
0.23682E 01	0.34161E 01	0.14584E 02	0.11559E 02	0.12617E 01
0.21955E 01	0.30772E 01	0.14923E 02	0.91399E 01	0.18327E 01
0.20467E 01	0.27872E 01	0.15213E 02	0.72755E 01	0.25852E 01
0.19141E 01	0.25395E 01	0.15460E 02	0.59025E 01	0.25193E 01
0.17929E 01	0.23275E 01	0.15673E 02	0.48542E 01	0.32237E 01
0.16802E 01	0.21450E 01	0.15855E 02	0.40647E 01	0.39007E 01
0.15745E 01	0.19866E 01	0.16013E 02	0.34571E 01	0.46166E 01
0.14751E 01	0.18477E 01	0.16152E 02	0.30113E 01	0.53639E 01
0.13814E 01	0.17245E 01	0.16278E 02	0.26597E 01	0.61193E 01
0.12933E 01	0.16138E 01	0.16386E 02	0.23848E 01	0.68711E 01
0.12105E 01	0.15133E 01	0.16487E 02	0.21664E 01	0.75152E 01
0.11328E 01	0.14210E 01	0.16579E 02	0.19895E 01	0.83327E 01
0.10600E 01	0.13355E 01	0.16664E 02	0.18437E 01	0.93368E 01
0.92795E 00	0.11609E 01	0.16819E 02	0.16143E 01	0.10419E 02
0.81218E 00	0.10435E 01	0.16956E 02	0.14366E 01	0.11553E 02
0.71057E 00	0.92635E 00	0.17080E 02	0.12685E 01	0.13255E 02
0.62125E 00	0.80959E 00	0.17190E 02	0.11583E 01	0.14871E 02
0.54269E 00	0.71015E 00	0.17290E 02	0.10403E 01	0.16620E 02

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.18000E 02	0.18000E 02	-0.23127E-03	0.32400E 03	-0.71377E-06
0.17859E 02	0.17917E 02	0.83432E-01	0.32146E 03	0.25954E-03
0.17452E 02	0.17673E 02	0.32746E 00	0.31402E 03	0.10428E-02
0.16818E 02	0.17288E 02	0.71227E 00	0.30217E 03	0.23572E-02
0.16017E 02	0.16791E 02	0.17093E 01	0.28670E 03	0.42180E-02
0.15118E 02	0.16214E 02	0.17857E 01	0.26852E 03	0.66560E-02
0.14187E 02	0.15591E 02	0.24093E 01	0.24864E 03	0.96897E-02
0.13279E 02	0.14948E 02	0.30521E 01	0.22801E 03	0.13386E-01
0.12435E 02	0.14308E 02	0.36924E 01	0.20745E 03	0.17799E-01
0.11678E 02	0.13685E 02	0.43153E 01	0.18765E 03	0.22996E-01
0.11015E 02	0.13088E 02	0.49118E 01	0.16969E 03	0.29048E-01
0.10443E 02	0.12523E 02	0.54771E 01	0.15209E 03	0.36013E-01
0.99500E 01	0.11990E 02	0.60096E 01	0.13679E 03	0.43932E-01
0.95198E 01	0.11491E 02	0.65091E 01	0.12325E 03	0.52813E-01
0.91370E 01	0.11024E 02	0.69763E 01	0.11140E 03	0.62625E-01
0.87877E 01	0.10588E 02	0.74120E 01	0.10112E 03	0.73297E-01
0.84606E 01	0.10182E 02	0.78175E 01	0.92277E 02	0.84718E-01
0.81478E 01	0.98061E 01	0.81939E 01	0.84692E 02	0.96750E-01
0.78443E 01	0.94573E 01	0.85427E 01	0.78202E 02	0.10924E 00
0.75475E 01	0.91344E 01	0.88656E 01	0.72645E 02	0.12204E 00
0.72566E 01	0.88356E 01	0.91644E 01	0.67877E 02	0.13502E 00
0.66941E 01	0.83013E 01	0.96987E 01	0.60192E 02	0.16113E 00
0.61643E 01	0.78362E 01	0.10164E 02	0.54285E 02	0.18723E 00
0.56753E 01	0.74226E 01	0.10577E 02	0.49533E 02	0.21354E 00
0.52314E 01	0.70459E 01	0.10954E 02	0.45505E 02	0.24072E 00
0.48331E 01	0.66949E 01	0.11305E 02	0.41922E 02	0.26967E 00
0.44783E 01	0.63627E 01	0.11637E 02	0.38613E 02	0.30139E 00
0.41632E 01	0.60451E 01	0.11955E 02	0.35486E 02	0.33689E 00
0.38840E 01	0.57401E 01	0.12260E 02	0.32500E 02	0.37722E 00
0.36366E 01	0.54472E 01	0.12553E 02	0.29646E 02	0.42342E 00
0.34175E 01	0.51665E 01	0.12834E 02	0.26930E 02	0.47655E 00
0.30510E 01	0.46431E 01	0.13357E 02	0.21966E 02	0.60806E 00
0.27616E 01	0.41730E 01	0.13827E 02	0.17702E 02	0.78109E 00
0.25299E 01	0.37568E 01	0.14243E 02	0.14166E 02	0.10054E 01
0.23401E 01	0.33924E 01	0.14608E 02	0.11319E 02	0.12906E 01
0.21799E 01	0.30759E 01	0.14924E 02	0.90745E 01	0.16446E 01
0.20401E 01	0.28024E 01	0.15198E 02	0.73327E 01	0.20726E 01
0.19145E 01	0.25663E 01	0.15434E 02	0.59933E 01	0.25752E 01
0.17990E 01	0.23621E 01	0.15638E 02	0.49678E 01	0.31478E 01
0.16913E 01	0.21847E 01	0.15815E 02	0.41826E 01	0.37810E 01
0.15899E 01	0.20296E 01	0.15970E 02	0.35801E 01	0.44609E 01
0.14941E 01	0.18927E 01	0.16107E 02	0.31143E 01	0.51720E 01
0.14036E 01	0.17707E 01	0.16229E 02	0.27514E 01	0.58986E 01
0.13182E 01	0.16608E 01	0.16339E 02	0.24653E 01	0.66275E 01
0.12376E 01	0.15609E 01	0.16439E 02	0.22369E 01	0.73490E 01
0.11616E 01	0.14691E 01	0.16531E 02	0.20517E 01	0.80572E 01
0.10232E 01	0.13046E 01	0.16695E 02	0.17765E 01	0.94277E 01
0.90100E 00	0.11599E 01	0.16840E 02	0.15644E 01	0.10765E 02
0.79329E 00	0.10304E 01	0.16970E 02	0.14013E 01	0.12110E 02
0.69822E 00	0.91378E 00	0.17086E 02	0.12637E 01	0.13520E 02
0.61423E 00	0.80844E 00	0.17192E 02	0.11421E 01	0.15053E 02

SC K(2)L(8)3S(2)3P(6) 1S

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.18000E 02	0.18000E 02	-0.19550E-04	0.32400E 03	-0.60340E-07
0.17885E 02	0.17933E 02	0.67267E-01	0.32193E 03	0.20895E-03
0.17549E 02	0.17735E 02	0.26479E 00	0.31582E 03	0.83844E-03
0.17020E 02	0.17420E 02	0.58019E 00	0.30600E 03	0.18960E-02
0.16338E 02	0.17005E 02	0.99482E 00	0.29301E 03	0.33952E-02
0.15551E 02	0.16514E 02	0.14863E 01	0.27747E 03	0.53565E-02
0.14710E 02	0.15969E 02	0.20310E 01	0.26011E 03	0.78083E-02
0.13860E 02	0.15393E 02	0.26069E 01	0.24165E 03	0.10788E-01
0.13040E 02	0.14805E 02	0.31949E 01	0.22276E 03	0.14342E-01
0.12277E 02	0.14220E 02	0.37798E 01	0.20405E 03	0.18524E-01
0.11586E 02	0.13649E 02	0.43509E 01	0.18599E 03	0.23393E-01
0.10973E 02	0.13099E 02	0.49009E 01	0.16895E 03	0.29009E-01
0.10436E 02	0.12574E 02	0.54259E 01	0.15317E 03	0.35425E-01
0.99656E 01	0.12076E 02	0.59238E 01	0.13879E 03	0.42682E-01
0.95517E 01	0.11606E 02	0.63941E 01	0.12587E 03	0.50801E-01
0.91817E 01	0.11163E 02	0.68371E 01	0.11438E 03	0.59776E-01
0.88443E 01	0.10747E 02	0.72533E 01	0.10426E 03	0.69571E-01
0.85298E 01	0.10356E 02	0.76437E 01	0.95406E 02	0.80112E-01
0.82305E 01	0.99908E 01	0.80092E 01	0.87702E 02	0.91323E-01
0.79413E 01	0.96492E 01	0.83508E 01	0.81020E 02	0.10307E 00
0.76590E 01	0.93303E 01	0.86697E 01	0.75232E 02	0.11524E 00
0.71098E 01	0.87552E 01	0.92448E 01	0.65866E 02	0.14036E 00
0.65824E 01	0.82534E 01	0.97466E 01	0.58748E 02	0.16591E 00
0.60841E 01	0.78113E 01	0.10139E 02	0.53199E 02	0.19152E 00
0.56224E 01	0.74155E 01	0.10584E 02	0.48706E 02	0.21731E 00
0.52016E 01	0.70544E 01	0.10946E 02	0.44904E 02	0.24376E 00
0.48229E 01	0.67187E 01	0.11281E 02	0.41542E 02	0.27156E 00
0.44843E 01	0.64019E 01	0.11598E 02	0.38459E 02	0.30157E 00
0.41829E 01	0.60997E 01	0.11900E 02	0.35560E 02	0.33466E 00
0.39149E 01	0.58097E 01	0.12190E 02	0.32795E 02	0.37172E 00
0.36766E 01	0.55310E 01	0.12469E 02	0.30144E 02	0.41365E 00
0.32755E 01	0.50066E 01	0.12993E 02	0.25188E 02	0.51585E 00
0.29562E 01	0.45275E 01	0.13472E 02	0.20761E 02	0.64893E 00
0.26995E 01	0.40957E 01	0.13904E 02	0.16935E 02	0.82106E 00
0.24902E 01	0.37113E 01	0.14289E 02	0.13729E 02	0.10408E 01
0.23157E 01	0.33723E 01	0.14628E 02	0.11113E 02	0.13162E 01
0.21661E 01	0.30755E 01	0.14925E 02	0.90206E 01	0.16545E 01
0.20343E 01	0.28165E 01	0.15183E 02	0.73701E 01	0.20601E 01
0.19149E 01	0.25910E 01	0.15409E 02	0.60804E 01	0.25342E 01
0.18047E 01	0.23942E 01	0.15606E 02	0.50773E 01	0.30736E 01
0.17015E 01	0.22218E 01	0.15778E 02	0.42982E 01	0.36709E 01
0.16041E 01	0.20700E 01	0.15930E 02	0.36918E 01	0.43150E 01
0.15119E 01	0.19353E 01	0.16065E 02	0.32177E 01	0.49927E 01
0.14244E 01	0.18147E 01	0.16185E 02	0.28444E 01	0.56902E 01
0.13415E 01	0.17057E 01	0.16294E 02	0.25479E 01	0.63952E 01
0.12630E 01	0.16064E 01	0.16394E 02	0.23098E 01	0.70975E 01
0.11189E 01	0.14305E 01	0.16570E 02	0.19562E 01	0.84704E 01
0.99078E 00	0.12774E 01	0.16723E 02	0.17077E 01	0.97924E 01
0.87721E 00	0.11413E 01	0.16859E 02	0.15208E 01	0.11086E 02
0.77655E 00	0.10189E 01	0.16981E 02	0.13702E 01	0.12393E 02
0.68727E 00	0.90813E 00	0.17092E 02	0.12418E 01	0.13764E 02

S(F(I,I))*2	S(F(I,I))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.18000E 02	0.18000E 02	-0.17095E-03	0.32400E 03	-0.52761E-06
0.17904E 02	0.17945E 02	0.55461E-01	0.32227E 03	0.17209E-06
0.17622E 02	0.17781E 02	0.21949E 00	0.31714E 03	0.69207E-03
0.17173E 02	0.17516E 02	0.48362E 00	0.30886E 03	0.15658E-02
0.16565E 02	0.17165E 02	0.83510E 00	0.29778E 03	0.25044E-06
0.15894E 02	0.16742E 02	0.12581E 01	0.28438E 03	0.44243E-02
0.15138E 02	0.16265E 02	0.17353E 01	0.26914E 03	0.64478E-02
0.14354E 02	0.15750E 02	0.22495E 01	0.25266E 03	0.59035E-02
0.13575E 02	0.15215E 02	0.27848E 01	0.23546E 03	0.11827E-01
0.12828E 02	0.14673E 02	0.33274E 01	0.21805E 03	0.15250E-01
0.12131E 02	0.14133E 02	0.38686E 01	0.20087E 03	0.19249E-01
0.11496E 02	0.13606E 02	0.43941E 01	0.18427E 03	0.23846E-01
7 0.10927E 02	0.13098E 02	0.49043E 01	0.16852E 03	0.29102E-01
0.10421E 02	0.12606E 02	0.53938E 01	0.15383E 03	0.35063E-01
0.99738E 01	0.12139E 02	0.58606E 01	0.14031E 03	0.41768E-01
0.95761E 01	0.11696E 02	0.63040E 01	0.12802E 03	0.49243E-01
0.92186E 01	0.11276E 02	0.67241E 01	0.11695E 03	0.57495E-01
0.88923E 01	0.10879E 02	0.71211E 01	0.10707E 03	0.66508E-01
0.85886E 01	0.10504E 02	0.74958E 01	0.98313E 02	0.76244E-01
0.83014E 01	0.10151E 02	0.78488E 01	0.90590E 02	0.86540E-01
0.80249E 01	0.98191E 01	0.81809E 01	0.83807E 02	0.97516E-01
0.74919E 01	0.92136E 01	0.87884E 01	0.72664E 02	0.12092E 00
0.69773E 01	0.86798E 01	0.93202E 01	0.64120E 02	0.14535E 00
0.64821E 01	0.82081E 01	0.97919E 01	0.57506E 02	0.17028E 00
0.60129E 01	0.77883E 01	0.10212E 02	0.52277E 02	0.19534E 00
0.55764E 01	0.74098E 01	0.10590E 02	0.48012E 02	0.22556E 00
0.51769E 01	0.70635E 01	0.10936E 02	0.44399E 02	0.24632E 00
0.48157E 01	0.67417E 01	0.11258E 02	0.41219E 02	0.27314E 00
0.44917E 01	0.64384E 01	0.11552E 02	0.38320E 02	0.30171E 00
0.42023E 01	0.61496E 01	0.11850E 02	0.35608E 02	0.33260E 00
0.39441E 01	0.58729E 01	0.12127E 02	0.33029E 02	0.36717E 00
0.35081E 01	0.55509E 01	0.12649E 02	0.28178E 02	0.44891E 00
0.31590E 01	0.48689E 01	0.13131E 02	0.23729E 02	0.55337E 00
0.28771E 01	0.44279E 01	0.13572E 02	0.19746E 02	0.66755E 00
0.26469E 01	0.40290E 01	0.13971E 02	0.16282E 02	0.85805E 00
0.24560E 01	0.36720E 01	0.14328E 02	0.13354E 02	0.10729E 01
0.22944E 01	0.33552E 01	0.14645E 02	0.10936E 02	0.13391E 01
0.21541E 01	0.30756E 01	0.14924E 02	0.89760E 01	0.16527E 01
0.20292E 01	0.28298E 01	0.15170E 02	0.74076E 01	0.20479E 01
0.19155E 01	0.26139E 01	0.15386E 02	0.61640E 01	0.24761E 01
0.18101E 01	0.24241E 01	0.15576E 02	0.51831E 01	0.30051E 01
0.17111E 01	0.22566E 01	0.15743E 02	0.44109E 01	0.35692E 01
0.16174E 01	0.21081E 01	0.15892E 02	0.38023E 01	0.41796E 01
0.15264E 01	0.19756E 01	0.16024E 02	0.33217E 01	0.48249E 01
0.14438E 01	0.18565E 01	0.16143E 02	0.29367E 01	0.54934E 01
0.13634E 01	0.17486E 01	0.16251E 02	0.26324E 01	0.61735E 01
0.12146E 01	0.15593E 01	0.16441E 02	0.21826E 01	0.75318E 01
0.10813E 01	0.13966E 01	0.16603E 02	0.18756E 01	0.88522E 01
0.96225E 00	0.12533E 01	0.16747E 02	0.16535E 01	0.10128E 02
0.85621E 00	0.11249E 01	0.16875E 02	0.14826E 01	0.11382E 02
0.76177E 00	0.10089E 01	0.16991E 02	0.13425E 01	0.12654E 02

S(F(1,1))*2	S(F(1,1))*2	L-F	(SF(1,1))*2	INC/COH
0.18998E 02	0.18998E 02	0.18573E-02	0.38090E 03	0.51453E-03
0.18721E 02	0.18782E 02	0.21775E 00	0.35582E 03	0.81231E-03
0.18002E 02	0.18236E 02	0.75439E 00	0.34888E 03	0.22424E-02
0.17065E 02	0.17559E 02	0.14413E 01	0.31990E 03	0.45055E-02
0.16081E 02	0.16885E 02	0.21155E 01	0.29608E 03	0.71455E-03
0.15110E 02	0.16237E 02	0.27531E 01	0.27180E 03	0.10106E-01
0.14183E 02	0.15595E 02	0.34050E 01	0.24838E 03	0.13709E-01
0.13256E 02	0.14749E 02	0.40506E 01	0.22522E 03	0.17907E-01
0.12415E 02	0.14309E 02	0.45914E 01	0.20541E 03	0.22839E-01
0.11559E 02	0.13887E 02	0.53126E 01	0.18597E 03	0.28557E-01
0.10999E 02	0.13095E 02	0.59048E 01	0.16796E 03	0.35156E-01
0.10429E 02	0.12536E 02	0.64545E 01	0.15140E 03	0.42577E-01
0.99378E 01	0.12008E 02	0.69918E 01	0.13558E 03	0.51191E-01
0.95092E 01	0.11512E 02	0.74880E 01	0.12331E 03	0.60726E-01
0.91273E 01	0.11046E 02	0.79543E 01	0.11162E 03	0.71255E-01
0.87783E 01	0.10609E 02	0.83914E 01	0.10142E 03	0.82735E-01
0.84513E 01	0.10200E 02	0.87997E 01	0.92501E 02	0.95529E-01
0.81385E 01	0.98203E 01	0.91797E 01	0.85008E 02	0.10799E 00
0.78352E 01	0.94678E 01	0.95322E 01	0.78490E 02	0.12144E 00
0.75389E 01	0.91417E 01	0.98583E 01	0.72897E 02	0.13524E 00
0.72486E 01	0.88402E 01	0.10180E 02	0.68089E 02	0.14921E 00
0.66879E 01	0.83827E 01	0.10697E 02	0.60328E 02	0.17733E 00
0.61601E 01	0.78364E 01	0.11164E 02	0.54554E 02	0.20539E 00
0.56727E 01	0.74229E 01	0.11577E 02	0.49555E 02	0.23353E 00
0.52299E 01	0.70465E 01	0.11953E 02	0.45493E 02	0.26275E 00
0.48322E 01	0.66961E 01	0.12354E 02	0.41890E 02	0.29372E 00
0.44776E 01	0.63643E 01	0.12836E 02	0.38573E 02	0.32758E 00
0.41627E 01	0.60470E 01	0.12953E 02	0.35446E 02	0.35543E 00
0.38834E 01	0.57423E 01	0.13258E 02	0.32465E 02	0.40837E 00
0.36360E 01	0.54496E 01	0.13550E 02	0.29619E 02	0.45756E 00
0.34169E 01	0.51690E 01	0.13831E 02	0.26911E 02	0.51355E 00
0.30506E 01	0.46459E 01	0.14354E 02	0.21962E 02	0.55355E 00
0.27612E 01	0.41758E 01	0.14824E 02	0.17708E 02	0.63717E 00
0.25296E 01	0.37594E 01	0.15241E 02	0.14175E 02	0.10731E 01
0.23399E 01	0.33947E 01	0.15555E 02	0.11326E 02	0.13776E 01
0.21797E 01	0.30778E 01	0.15922E 02	0.90323E 01	0.17531E 01
0.20399E 01	0.28039E 01	0.16196E 02	0.73382E 01	0.22071E 01
0.19143E 01	0.25673E 01	0.16433E 02	0.59965E 01	0.27404E 01
0.17989E 01	0.23628E 01	0.16637E 02	0.49692E 01	0.33431E 01
0.16911E 01	0.21852E 01	0.16815E 02	0.41829E 01	0.40109E 01
0.15898E 01	0.20298E 01	0.16970E 02	0.35772E 01	0.57413E 01
0.14940E 01	0.18928E 01	0.17167E 02	0.31130E 01	0.54954E 01
0.14036E 01	0.17707E 01	0.17229E 02	0.27498E 01	0.32557E 01
0.13181E 01	0.16658E 01	0.17339E 02	0.24557E 01	0.75379E 01
0.12375E 01	0.15608E 01	0.17439E 02	0.22353E 01	0.78017E 01
0.11615E 01	0.14670E 01	0.17531E 02	0.20502E 01	0.85507E 01
0.10231E 01	0.13846E 01	0.17695E 02	0.17694E 01	0.10001E 02
0.90096E 00	0.11599E 01	0.17840E 02	0.15537E 01	0.11409E 02
0.79324E 00	0.10305E 01	0.17959E 02	0.14011E 01	0.12825E 02
0.69818E 00	0.91394E 00	0.18586E 02	0.12638E 01	0.14311E 02
0.61419E 00	0.80866E 00	0.18191E 02	0.11424E 01	0.15924E 02

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.19005E 02	0.19005E 02	-0.45526E-02	0.36109E 03	-0.12608E-04
0.18906E 02	0.18949E 02	0.50631E-01	0.35921E 03	0.14095E-03
0.18616E 02	0.18787E 02	0.21342E 00	0.35365E 03	0.60348E-03
0.18153E 02	0.18524E 02	0.47587E 00	0.34467E 03	0.13807E-02
0.17546E 02	0.18174E 02	0.82572E 00	0.33263E 03	0.24824E-02
0.16828E 02	0.17752E 02	0.12478E 01	0.31803E 03	0.39236E-02
0.16039E 02	0.17274E 02	0.17256E 01	0.30143E 03	0.57246E-02
0.15214E 02	0.16758E 02	0.22424E 01	0.28341E 03	0.79122E-02
0.14389E 02	0.16217E 02	0.27829E 01	0.26454E 03	0.10520E-01
0.13590E 02	0.15666E 02	0.33339E 01	0.24538E 03	0.13587E-01
0.12838E 02	0.15116E 02	0.38845E 01	0.22638E 03	0.17160E-01
0.12147E 02	0.14573E 02	0.44266E 01	0.20793E 03	0.21289E-01
0.11522E 02	0.14046E 02	0.49542E 01	0.19035E 03	0.26027E-01
0.10966E 02	0.13536E 02	0.54637E 01	0.17385E 03	0.31428E-01
0.10472E 02	0.13047E 02	0.59527E 01	0.15857E 03	0.37539E-01
0.10035E 02	0.12580E 02	0.64200E 01	0.14459E 03	0.44401E-01
0.96468E 01	0.12135E 02	0.68655E 01	0.13193E 03	0.52039E-01
0.92971E 01	0.11711E 02	0.72891E 01	0.12055E 03	0.60463E-01
0.89776E 01	0.11309E 02	0.76913E 01	0.11041E 03	0.69663E-01
0.86809E 01	0.10927E 02	0.80725E 01	0.10141E 03	0.79606E-01
0.84005E 01	0.10566E 02	0.84335E 01	0.93458E 02	0.90238E-01
0.78708E 01	0.99028E 01	0.90972E 01	0.80316E 02	0.11327E 00
0.73652E 01	0.93117E 01	0.96883E 01	0.70187E 02	0.13804E 00
0.68768E 01	0.87860E 01	0.10214E 02	0.62355E 02	0.16380E 00
0.64080E 01	0.83175E 01	0.10682E 02	0.56225E 02	0.19000E 00
0.59643E 01	0.78972E 01	0.11103E 02	0.51322E 02	0.21633E 00
0.55509E 01	0.75165E 01	0.11484E 02	0.47286E 02	0.24285E 00
0.51711E 01	0.71672E 01	0.11833E 02	0.43848E 02	0.26986E 00
0.48259E 01	0.68429E 01	0.12157E 02	0.40816E 02	0.29785E 00
0.45144E 01	0.65384E 01	0.12462E 02	0.38058E 02	0.32744E 00
0.42345E 01	0.62498E 01	0.12750E 02	0.35485E 02	0.35931E 00
0.37586E 01	0.57110E 01	0.13289E 02	0.30710E 02	0.43273E 00
0.33755E 01	0.52159E 01	0.13784E 02	0.26311E 02	0.52389E 00
0.30652E 01	0.47612E 01	0.14239E 02	0.22289E 02	0.63882E 00
0.28116E 01	0.43467E 01	0.14653E 02	0.18693E 02	0.78391E 00
0.26019E 01	0.39719E 01	0.15028E 02	0.15559E 02	0.96588E 00
0.24258E 01	0.36359E 01	0.15364E 02	0.12894E 02	0.11916E 01
0.22748E 01	0.33366E 01	0.15663E 02	0.10673E 02	0.14675E 01
0.21425E 01	0.30713E 01	0.15929E 02	0.88529E 01	0.17993E 01
0.20238E 01	0.28366E 01	0.16163E 02	0.73734E 01	0.21906E 01
0.19152E 01	0.26294E 01	0.16371E 02	0.61941E 01	0.26430E 01
0.18141E 01	0.24460E 01	0.16554E 02	0.52476E 01	0.31546E 01
0.17190E 01	0.22833E 01	0.16717E 02	0.44930E 01	0.37207E 01
0.16289E 01	0.21383E 01	0.16862E 02	0.38910E 01	0.43335E 01
0.15430E 01	0.20084E 01	0.16992E 02	0.34098E 01	0.49832E 01
0.14612E 01	0.18912E 01	0.17109E 02	0.30234E 01	0.56589E 01
0.13090E 01	0.16872E 01	0.17313E 02	0.24571E 01	0.70460E 01
0.11714E 01	0.15140E 01	0.17486E 02	0.20752E 01	0.84260E 01
0.10475E 01	0.13630E 01	0.17637E 02	0.18061E 01	0.97652E 01
0.93655E 00	0.12287E 01	0.17771E 02	0.16062E 01	0.11064E 02
0.83723E 00	0.11076E 01	0.17892E 02	0.14490E 01	0.12348E 02

V K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(2) 3F

S(F(1,I))**2	S(F(1,J))**2	Z-I	(SF(1,I))**2	INC/CH
0.20000E 02	0.20000E 02	-0.72241E-04	0.40000E 03	-0.18000E-05
0.19830E 02	0.19733E 02	0.66641E-01	0.39760E 03	0.15751E-03
0.19530E 02	0.19737E 02	0.26256E 00	0.39052E 03	0.57233E-03
0.18974E 02	0.19424E 02	0.57579E 00	0.37914E 03	0.15167E-02
0.18253E 02	0.19012E 02	0.98843E 00	0.36401E 03	0.27154E-02
0.17412E 02	0.18521E 02	0.14792E 01	0.34586E 03	0.42759E-02
0.16501E 02	0.17974E 02	0.20260E 01	0.32546E 03	0.62251E-02
0.15565E 02	0.17392E 02	0.25052E 01	0.30363E 03	0.85901E-02
0.14645E 02	0.16792E 02	0.32079E 01	0.28112E 03	0.11411E-01
0.13775E 02	0.16189E 02	0.38108E 01	0.25860E 03	0.14755E-01
0.12961E 02	0.15594E 02	0.44064E 01	0.23662E 03	0.18622E-01
0.12230E 02	0.15013E 02	0.49573E 01	0.21563E 03	0.23129E-01
0.11580E 02	0.14451E 02	0.55490E 01	0.19593E 03	0.28321E-01
0.11058E 02	0.13911E 02	0.60887E 01	0.17773E 03	0.34253E-01
0.10507E 02	0.13395E 02	0.66053E 01	0.16112E 03	0.40995E-01
0.10067E 02	0.12902E 02	0.70984E 01	0.14613E 03	0.48574E-01
0.95769E 01	0.12432E 02	0.75679E 01	0.13273E 03	0.57617E-01
0.93267E 01	0.11986E 02	0.80144E 01	0.12083E 03	0.68327E-01
0.90066E 01	0.11562E 02	0.84383E 01	0.11033E 03	0.78479E-01
0.87086E 01	0.11160E 02	0.88400E 01	0.10111E 03	0.87425E-01
0.84262E 01	0.10780E 02	0.92203E 01	0.93043E 02	0.99096E-01
0.78910E 01	0.10081E 02	0.99186E 01	0.79841E 02	0.12423E 00
0.73795E 01	0.94609E 01	0.10539E 02	0.59773E 02	0.15104E 00
0.68866E 01	0.89106E 01	0.11069E 02	0.52051E 02	0.17871E 00
0.64152E 01	0.84215E 01	0.11578E 02	0.56019E 02	0.20669E 00
0.59705E 01	0.79840E 01	0.12016E 02	0.51191E 02	0.23475E 00
0.55573E 01	0.75886E 01	0.12411E 02	0.47201E 02	0.26295E 00
0.51780E 01	0.72267E 01	0.12773E 02	0.43784E 02	0.29173E 00
0.48332E 01	0.68919E 01	0.13108E 02	0.40754E 02	0.32154E 00
0.45217E 01	0.65781E 01	0.13422E 02	0.37985E 02	0.35335E 00
0.42415E 01	0.62816E 01	0.13718E 02	0.35390E 02	0.38757E 00
0.37639E 01	0.57304E 01	0.14270E 02	0.30585E 02	0.45656E 00
0.33788E 01	0.52265E 01	0.14773E 02	0.26163E 02	0.56488E 00
0.30667E 01	0.47658E 01	0.15234E 02	0.22134E 02	0.68827E 00
0.28120E 01	0.43472E 01	0.15653E 02	0.18545E 02	0.84404E 00
0.26016E 01	0.39898E 01	0.16030E 02	0.15428E 02	0.10391E 01
0.24252E 01	0.36321E 01	0.16358E 02	0.12783E 02	0.12805E 01
0.22741E 01	0.33318E 01	0.16688E 02	0.10582E 02	0.15751E 01
0.21418E 01	0.30658E 01	0.16934E 02	0.87832E 01	0.19257E 01
0.20231E 01	0.28310E 01	0.17169E 02	0.73216E 01	0.23450E 01
0.19145E 01	0.26236E 01	0.17378E 02	0.61504E 01	0.28253E 01
0.18135E 01	0.24404E 01	0.17560E 02	0.52144E 01	0.35575E 01
0.17185E 01	0.22779E 01	0.17722E 02	0.44681E 01	0.39864E 01
0.16283E 01	0.21332E 01	0.17857E 02	0.38726E 01	0.45137E 01
0.15426E 01	0.20035E 01	0.17996E 02	0.33963E 01	0.52989E 01
0.14638E 01	0.18866E 01	0.18113E 02	0.30136E 01	0.60155E 01
0.13086E 01	0.16832E 01	0.18317E 02	0.24525E 01	0.74666E 01
0.11711E 01	0.15105E 01	0.18469E 02	0.20734E 01	0.89174E 01
0.10473E 01	0.13600E 01	0.18640E 02	0.18056E 01	0.10322E 02
0.93637E 00	0.12261E 01	0.18774E 02	0.16066E 01	0.11585E 02
0.83710E 00	0.11054E 01	0.18895E 02	0.14493E 01	0.13033E 02

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2		INC/COH
0.21000E 02	0.21000E 02	0.19073E-04	0.44100E 03	0.43251E-07			
0.20880E 02	0.20934E 02	0.65521E-01	0.43848E 03	0.14943E-03			
0.20529E 02	0.20742E 02	0.25811E 00	0.43103E 03	0.59882E-03			
0.19970E 02	0.20433E 02	0.56662E 00	0.41903E 03	0.13522E-02			
0.19240E 02	0.20026E 02	0.97429E 00	0.40305E 03	0.24173E-02			
0.18384E 02	0.19539E 02	0.14610E 01	0.38381E 03	0.38066E-02			
0.17449E 02	0.18994E 02	0.20057E 01	0.36210E 03	0.55390E-02			
0.16480E 02	0.18412E 02	0.25883E 01	0.33874E 03	0.76410E-02			
0.15517E 02	0.17808E 02	0.31916E 01	0.31452E 03	0.10147E-01			
0.14592E 02	0.17199E 02	0.38012E 01	0.29014E 03	0.13101E-01			
0.13727E 02	0.16593E 02	0.44066E 01	0.26620E 03	0.16554E-01			
0.12936E 02	0.16000E 02	0.50001E 01	0.24317E 03	0.20563E-01			
0.12226E 02	0.15423E 02	0.55768E 01	0.22139E 03	0.25190E-01			
0.11597E 02	0.14866E 02	0.61338E 01	0.20112E 03	0.30499E-01			
0.11043E 02	0.14331E 02	0.66694E 01	0.18247E 03	0.36550E-01			
0.10557E 02	0.13817E 02	0.71830E 01	0.16552E 03	0.43396E-01			
0.10128E 02	0.13325E 02	0.76746E 01	0.15025E 03	0.51079E-01			
0.97479E 01	0.12856E 02	0.81443E 01	0.13659E 03	0.59625E-01			
0.94055E 01	0.12408E 02	0.85925E 01	0.12446E 03	0.69040E-01			
0.90923E 01	0.11980E 02	0.90196E 01	0.11373E 03	0.79307E-01			
0.88009E 01	0.11574E 02	0.94260E 01	0.10428E 03	0.90388E-01			
0.82609E 01	0.10821E 02	0.10179E 02	0.88725E 02	0.11472E 00			
0.77542E 01	0.10145E 02	0.10855E 02	0.76791E 02	0.14136E 00			
0.72674E 01	0.95402E 01	0.11460E 02	0.67619E 02	0.16948E 00			
0.67983E 01	0.89999E 01	0.12000E 02	0.60501E 02	0.19834E 00			
0.63503E 01	0.85163E 01	0.12484E 02	0.54883E 02	0.22746E 00			
0.59279E 01	0.80813E 01	0.12919E 02	0.50340E 02	0.25663E 00			
0.55347E 01	0.76865E 01	0.13313E 02	0.46555E 02	0.28597E 00			
0.51727E 01	0.73248E 01	0.13675E 02	0.43299E 02	0.31583E 00			
0.48424E 01	0.69899E 01	0.14010E 02	0.40407E 02	0.34672E 00			
0.45426E 01	0.66768E 01	0.14323E 02	0.37766E 02	0.37926E 00			
0.40270E 01	0.61019E 01	0.14898E 02	0.32966E 02	0.45193E 00			
0.36076E 01	0.55810E 01	0.15419E 02	0.28539E 02	0.53933E 00			
0.32660E 01	0.51054E 01	0.15895E 02	0.24561E 02	0.64714E 00			
0.29862E 01	0.46713E 01	0.16329E 02	0.20900E 02	0.78128E 00			
0.27552E 01	0.42771E 01	0.16723E 02	0.17640E 02	0.94803E 00			
0.25622E 01	0.39213E 01	0.17079E 02	0.14801E 02	0.11539E 01			
0.23983E 01	0.36021E 01	0.17398E 02	0.12378E 02	0.14055E 01			
0.22565E 01	0.33172E 01	0.17683E 02	0.10346E 02	0.17091E 01			
0.21313E 01	0.30637E 01	0.17936E 02	0.86661E 01	0.20697E 01			
0.20182E 01	0.28387E 01	0.18161E 02	0.72910E 01	0.24909E 01			
0.19143E 01	0.26391E 01	0.18361E 02	0.61740E 01	0.29739E 01			
0.18173E 01	0.24616E 01	0.18538E 02	0.52709E 01	0.35171E 01			
0.17259E 01	0.23035E 01	0.18696E 02	0.45424E 01	0.41160E 01			
0.16390E 01	0.21620E 01	0.18838E 02	0.39547E 01	0.47634E 01			
0.15561E 01	0.20348E 01	0.18965E 02	0.34798E 01	0.54500E 01			
0.14014E 01	0.18148E 01	0.19185E 02	0.27809E 01	0.68989E 01			
0.12604E 01	0.16300E 01	0.19370E 02	0.23106E 01	0.83830E 01			
0.11325E 01	0.14706E 01	0.19529E 02	0.19835E 01	0.98457E 01			
0.10171E 01	0.13301E 01	0.19670E 02	0.17462E 01	0.11264E 02			
0.91331E 00	0.12041E 01	0.19796E 02	0.15653E 01	0.12647E 02			

MN K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(4) 5D

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.22000E 02	0.22000E 02	0.17190E-03	0.48400E 03	0.35517E-06
0.21880E 02	0.21936E 02	0.64432E-01	0.48136E 03	0.13365E-05
0.21529E 02	0.21746E 02	0.25358E 00	0.47359E 03	0.53546E-03
0.20970E 02	0.21443E 02	0.55726E 00	0.46103E 03	0.12087E-02
0.20236E 02	0.21040E 02	0.95979E 00	0.44426E 03	0.21594E-02
0.19369E 02	0.20558E 02	0.14422E 01	0.42399E 03	0.34016E-02
0.18415E 02	0.20015E 02	0.19845E 01	0.40103E 03	0.49485E-02
0.17418E 02	0.19433E 02	0.25674E 01	0.37621E 03	0.68244E-02
0.16418E 02	0.18626E 02	0.31737E 01	0.35033E 03	0.90593E-02
0.15447E 02	0.18211E 02	0.37895E 01	0.32413E 03	0.11691E-01
0.14530E 02	0.17596E 02	0.44038E 01	0.29824E 03	0.14755E-01
0.13682E 02	0.16991E 02	0.50067E 01	0.27316E 03	0.18336E-01
0.12914E 02	0.16401E 02	0.55990E 01	0.24931E 03	0.22458E-01
0.12226E 02	0.15829E 02	0.61713E 01	0.22693E 03	0.27194E-01
0.11617E 02	0.15276E 02	0.67237E 01	0.20622E 03	0.32605E-01
0.11081E 02	0.14744E 02	0.72555E 01	0.18725E 03	0.38748E-01
0.10609E 02	0.14234E 02	0.77664E 01	0.17003E 03	0.45677E-01
0.10192E 02	0.13744E 02	0.82565E 01	0.15453E 03	0.53431E-01
0.98196E 01	0.13274E 02	0.87260E 01	0.14065E 03	0.62040E-01
0.94840E 01	0.12825E 02	0.91753E 01	0.12830E 03	0.71512E-01
0.91767E 01	0.12395E 02	0.96048E 01	0.11736E 03	0.81839E-01
0.86213E 01	0.11594E 02	0.10406E 02	0.99180E 02	0.10472E 00
0.81136E 01	0.10858E 02	0.11132E 02	0.85099E 02	0.13081E 00
0.76322E 01	0.10213E 02	0.11787E 02	0.74214E 02	0.15883E 00
0.71684E 01	0.96234E 01	0.12377E 02	0.65761E 02	0.18820E 00
0.67219E 01	0.90935E 01	0.12907E 02	0.59130E 02	0.21827E 00
0.62956E 01	0.86160E 01	0.13364E 02	0.53842E 02	0.24858E 00
0.58933E 01	0.81640E 01	0.13816E 02	0.49530E 02	0.27894E 00
0.55181E 01	0.77903E 01	0.14210E 02	0.45919E 02	0.30945E 00
0.51715E 01	0.74287E 01	0.14571E 02	0.42806E 02	0.34040E 00
0.48540E 01	0.70937E 01	0.14908E 02	0.40042E 02	0.37226E 00
0.43019E 01	0.64865E 01	0.15514E 02	0.35179E 02	0.44098E 00
0.38483E 01	0.59433E 01	0.16057E 02	0.30844E 02	0.52057E 00
0.34764E 01	0.54502E 01	0.16550E 02	0.26855E 02	0.61627E 00
0.31705E 01	0.50002E 01	0.17000E 02	0.23177E 02	0.73349E 00
0.29174E 01	0.45898E 01	0.17410E 02	0.19833E 02	0.87784E 00
0.27061E 01	0.42170E 01	0.17783E 02	0.16853E 02	0.10552E 01
0.25275E 01	0.38801E 01	0.18120E 02	0.14249E 02	0.12717E 01
0.23744E 01	0.35770E 01	0.18423E 02	0.12016E 02	0.15332E 01
0.22408E 01	0.33056E 01	0.18694E 02	0.10130E 02	0.18455E 01
0.21217E 01	0.30632E 01	0.18937E 02	0.85566E 01	0.22131E 01
0.20137E 01	0.28470E 01	0.19153E 02	0.72571E 01	0.26392E 01
0.19140E 01	0.26542E 01	0.19346E 02	0.61908E 01	0.31249E 01
0.18207E 01	0.24820E 01	0.19518E 02	0.53199E 01	0.36689E 01
0.17326E 01	0.23280E 01	0.19672E 02	0.46100E 01	0.42572E 01
0.16487E 01	0.21895E 01	0.19810E 02	0.40316E 01	0.49138E 01
0.14919E 01	0.19512E 01	0.20049E 02	0.31736E 01	0.53174E 01
0.13483E 01	0.17527E 01	0.20247E 02	0.25942E 01	0.78048E 01
0.12172E 01	0.15831E 01	0.20417E 02	0.21935E 01	0.93077E 01
0.10980E 01	0.14351E 01	0.20565E 02	0.19073E 01	0.10782E 02
0.99001E 00	0.13032E 01	0.20697E 02	0.16943E 01	0.12215E 02

FE K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(5) 6S

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.23000E 02	0.23000E 02	0.33665E-03	0.52899E 03	0.63639E-06
0.22881E 02	0.22937E 02	0.62990E-01	0.52627E 03	0.11969E-03
0.22534E 02	0.22752E 02	0.24764E 00	0.51822E 03	0.47787E-03
0.21977E 02	0.22455E 02	0.54479E 00	0.50519E 03	0.10784E-02
0.21244E 02	0.22060E 02	0.94001E 00	0.48775E 03	0.19272E-02
0.20373E 02	0.21584E 02	0.14157E 01	0.46659E 03	0.30340E-02
0.19407E 02	0.21047E 02	0.19529E 01	0.44252E 03	0.44131E-02
0.18389E 02	0.20467E 02	0.25332E 01	0.41636E 03	0.60842E-02
0.17358E 02	0.19860E 02	0.31401E 01	0.38894E 03	0.80737E-02
0.16347E 02	0.19240E 02	0.37596E 01	0.36100E 03	0.10415E-01
0.15381E 02	0.18619E 02	0.43807E 01	0.33320E 03	0.13147E-01
0.14480E 02	0.18005E 02	0.49952E 01	0.30611E 03	0.16319E-01
0.13653E 02	0.17403E 02	0.55974E 01	0.28014E 03	0.19981E-01
0.12907E 02	0.16816E 02	0.61836E 01	0.25561E 03	0.24192E-01
0.12241E 02	0.16248E 02	0.67515E 01	0.23273E 03	0.29011E-01
0.11651E 02	0.15700E 02	0.73001E 01	0.21162E 03	0.34497E-01
0.11130E 02	0.15171E 02	0.78290E 01	0.19232E 03	0.40708E-01
0.10670E 02	0.14662E 02	0.83380E 01	0.17482E 03	0.47695E-01
0.10262E 02	0.14173E 02	0.88273E 01	0.15905E 03	0.55499E-01
0.98972E 01	0.13703E 02	0.92973E 01	0.14493E 03	0.64149E-01
0.95675E 01	0.13252E 02	0.97482E 01	0.13234E 03	0.73659E-01
0.89845E 01	0.12406E 02	0.10594E 02	0.11125E 03	0.95228E-01
0.84669E 01	0.11632E 02	0.11368E 02	0.94767E 02	0.11995E 00
0.79856E 01	0.10928E 02	0.12072E 02	0.81943E 02	0.14732E 00
0.75258E 01	0.10290E 02	0.12710E 02	0.71955E 02	0.17663E 00
0.70824E 01	0.97135E 01	0.13287E 02	0.64131E 02	0.20718E 00
0.66558E 01	0.91921E 01	0.13808E 02	0.57933E 02	0.23834E 00
0.62488E 01	0.87200E 01	0.14280E 02	0.52943E 02	0.26972E 00
0.58645E 01	0.82908E 01	0.14709E 02	0.48841E 02	0.30117E 00
0.55055E 01	0.78984E 01	0.15102E 02	0.45385E 02	0.33275E 00
0.51730E 01	0.75372E 01	0.15463E 02	0.42393E 02	0.36475E 00
0.45875E 01	0.68896E 01	0.16110E 02	0.37313E 02	0.43176E 00
0.41004E 01	0.63181E 01	0.16682E 02	0.32940E 02	0.50643E 00
0.36978E 01	0.58038E 01	0.17196E 02	0.28974E 02	0.59350E 00
0.33649E 01	0.53361E 01	0.17664E 02	0.25309E 02	0.69793E 00
0.30885E 01	0.49092E 01	0.18091E 02	0.21934E 02	0.82477E 00
0.28576E 01	0.45198E 01	0.18480E 02	0.18870E 02	0.97932E 00
0.26629E 01	0.41659E 01	0.18834E 02	0.16138E 02	0.11671E 01
0.24968E 01	0.38455E 01	0.19155E 02	0.13743E 02	0.13937E 01
0.23531E 01	0.35566E 01	0.19443E 02	0.11679E 02	0.16648E 01
0.22265E 01	0.32970E 01	0.19703E 02	0.99247E 01	0.19853E 01
0.21130E 01	0.30642E 01	0.19936E 02	0.84493E 01	0.23594E 01
0.20095E 01	0.28558E 01	0.20144E 02	0.72197E 01	0.27902E 01
0.19137E 01	0.26691E 01	0.20331E 02	0.62012E 01	0.32785E 01
0.18238E 01	0.25018E 01	0.20498E 02	0.53613E 01	0.38234E 01
0.17387E 01	0.23514E 01	0.20649E 02	0.46701E 01	0.44214E 01
0.15801E 01	0.20929E 01	0.20907E 02	0.36339E 01	0.57534E 01
0.14345E 01	0.18789E 01	0.21121E 02	0.29284E 01	0.72126E 01
0.13007E 01	0.16979E 01	0.21302E 02	0.24403E 01	0.87293E 01
0.11783E 01	0.15412E 01	0.21459E 02	0.20944E 01	0.10246E 02
0.10667E 01	0.14028E 01	0.21597E 02	0.18412E 01	0.11730E 02

FE K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(6) 5D

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.24000E 02	0.24000E 02	-0.45730E-04	0.57800E 03	-0.81128E-07
0.23855E 02	0.23919E 02	0.80768E-01	0.57253E 03	0.14157E-03
0.23434E 02	0.23683E 02	0.31717E 00	0.56233E 03	0.56403E-02
0.22765E 02	0.23308E 02	0.69220E 00	0.54594E 03	0.12679E-02
0.21896E 02	0.22819E 02	0.11811E 01	0.52423E 03	0.22530E-02
0.20831E 02	0.22245E 02	0.17555E 01	0.49825E 03	0.35232E-02
0.19777E 02	0.21613E 02	0.23872E 01	0.46918E 03	0.50881E-02
0.18637E 02	0.20948E 02	0.30516E 01	0.43812E 03	0.59653E-02
0.17505E 02	0.20271E 02	0.37289E 01	0.40614E 03	0.91813E-02
0.16417E 02	0.19595E 02	0.44045E 01	0.37414E 03	0.11772E-01
0.15398E 02	0.18931E 02	0.50691E 01	0.34288E 03	0.14734E-01
0.14462E 02	0.18283E 02	0.57167E 01	0.31291E 03	0.16269E-01
0.13617E 02	0.17656E 02	0.63445E 01	0.28465E 03	0.22289E-01
0.12864E 02	0.17049E 02	0.69512E 01	0.25835E 03	0.25906E-01
0.12198E 02	0.16463E 02	0.75366E 01	0.23415E 03	0.32186E-01
0.11613E 02	0.15899E 02	0.81009E 01	0.21210E 03	0.38194E-01
0.11099E 02	0.15355E 02	0.86448E 01	0.19215E 03	0.44989E-01
0.10645E 02	0.14831E 02	0.91685E 01	0.17425E 03	0.52622E-01
0.10244E 02	0.14328E 02	0.96725E 01	0.15823E 03	0.61131E-01
0.98841E 01	0.13843E 02	0.10157E 02	0.14398E 03	0.70542E-01
0.95579E 01	0.13378E 02	0.10622E 02	0.13136E 03	0.80862E-01
0.89779E 01	0.12505E 02	0.11495E 02	0.11036E 03	0.10415E 00
0.84594E 01	0.11707E 02	0.12293E 02	0.94055E 02	0.13070E 00
0.79756E 01	0.10983E 02	0.13017E 02	0.81417E 02	0.15988E 00
0.75132E 01	0.10329E 02	0.13671E 02	0.71591E 02	0.19096E 00
0.70681E 01	0.97400E 01	0.14250E 02	0.63894E 02	0.22318E 00
0.66409E 01	0.92095E 01	0.14791E 02	0.57788E 02	0.25595E 00
0.62343E 01	0.87508E 01	0.15289E 02	0.52860E 02	0.28866E 00
0.58512E 01	0.82970E 01	0.15703E 02	0.48798E 02	0.32180E 00
0.54936E 01	0.79014E 01	0.16099E 02	0.45363E 02	0.35488E 00
0.51627E 01	0.75380E 01	0.16462E 02	0.42382E 02	0.38842E 00
0.45801E 01	0.68878E 01	0.17112E 02	0.37300E 02	0.45877E 00
0.40952E 01	0.63148E 01	0.17685E 02	0.32914E 02	0.53731E 00
0.36939E 01	0.57997E 01	0.18200E 02	0.28933E 02	0.62904E 00
0.33619E 01	0.53315E 01	0.18668E 02	0.25258E 02	0.73911E 00
0.30861E 01	0.49043E 01	0.19096E 02	0.21878E 02	0.87282E 00
0.28557E 01	0.45149E 01	0.19485E 02	0.18814E 02	0.10357E 01
0.26613E 01	0.41609E 01	0.19839E 02	0.16084E 02	0.12335E 01
0.24956E 01	0.38407E 01	0.20159E 02	0.13695E 02	0.14720E 01
0.23521E 01	0.35520E 01	0.20448E 02	0.11837E 02	0.17571E 01
0.22257E 01	0.32926E 01	0.20707E 02	0.98892E 01	0.20940E 01
0.21124E 01	0.30601E 01	0.20940E 02	0.84201E 01	0.24869E 01
0.20091E 01	0.28520E 01	0.21148E 02	0.71960E 01	0.29388E 01
0.19134E 01	0.26656E 01	0.21334E 02	0.61824E 01	0.34558E 01
0.18236E 01	0.24985E 01	0.21502E 02	0.53465E 01	0.40216E 01
0.17386E 01	0.23483E 01	0.21652E 02	0.46586E 01	0.46477E 01
0.15801E 01	0.20904E 01	0.21910E 02	0.36275E 01	0.56408E 01
0.14345E 01	0.18767E 01	0.22123E 02	0.29242E 01	0.75556E 01
0.13008E 01	0.16959E 01	0.22304E 02	0.24377E 01	0.91495E 01
0.11764E 01	0.15395E 01	0.22451E 02	0.20927E 01	0.10733E 02
0.10668E 01	0.14013E 01	0.22599E 02	0.18400E 01	0.12282E 02

CO K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(6) 5D

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2		INC/COH
0.24000E 02	0.24000E 02	-0.15426E-03	0.57600E 03	-0.26781E-06			
0.23882E 02	0.23938E 02	0.62119E-01	0.57317E 03	0.10838E-03			
0.23535E 02	0.23754E 02	0.24572E 00	0.56479E 03	0.43506E-03			
0.22979E 02	0.23459E 02	0.54143E 00	0.55122E 03	0.98224E-03			
0.22243E 02	0.23065E 02	0.93521E 00	0.53301E 03	0.17546E-02			
0.21365E 02	0.22590E 02	0.14099E 01	0.51086E 03	0.27599E-02			
0.20337E 02	0.22053E 02	0.19471E 01	0.48559E 03	0.40098E-02			
0.19349E 02	0.21471E 02	0.25288E 01	0.45804E 03	0.55210E-02			
0.18290E 02	0.20861E 02	0.31387E 01	0.42903E 03	0.73157E-02			
0.17243E 02	0.20237E 02	0.37629E 01	0.39935E 03	0.94226E-02			
0.16235E 02	0.19610E 02	0.43904E 01	0.36967E 03	0.11876E-01			
0.15285E 02	0.18987E 02	0.50129E 01	0.34058E 03	0.14719E-01			
0.14407E 02	0.18375E 02	0.56247E 01	0.31254E 03	0.17997E-01			
0.13607E 02	0.17778E 02	0.62218E 01	0.28590E 03	0.21762E-01			
0.12887E 02	0.17198E 02	0.68019E 01	0.26091E 03	0.26070E-01			
0.12245E 02	0.16636E 02	0.73639E 01	0.23771E 03	0.30979E-01			
0.11675E 02	0.16093E 02	0.79071E 01	0.21636E 03	0.36545E-01			
0.11171E 02	0.15569E 02	0.84314E 01	0.19689E 03	0.42823E-01			
0.10724E 02	0.15063E 02	0.89371E 01	0.17923E 03	0.49862E-01			
0.10327E 02	0.14576E 02	0.94243E 01	0.16332E 03	0.57703E-01			
0.99697E 01	0.14107E 02	0.98933E 01	0.14905E 03	0.66375E-01			
0.93492E 01	0.13222E 02	0.10778E 02	0.12494E 03	0.86264E-01			
0.88127E 01	0.12407E 02	0.11593E 02	0.10590E 03	0.10947E 00			
0.83255E 01	0.11660E 02	0.12340E 02	0.90945E 02	0.13569E 00			
0.78669E 01	0.10977E 02	0.13023E 02	0.79225E 02	0.16437E 00			
0.74268E 01	0.10357E 02	0.13643E 02	0.70012E 02	0.19487E 00			
0.70023E 01	0.97929E 01	0.14207E 02	0.62721E 02	0.22651E 00			
0.65942E 01	0.92811E 01	0.14719E 02	0.56886E 02	0.25874E 00			
0.62051E 01	0.88158E 01	0.15184E 02	0.52146E 02	0.29119E 00			
0.58376E 01	0.83911E 01	0.15609E 02	0.48220E 02	0.32370E 00			
0.54937E 01	0.80017E 01	0.15998E 02	0.44896E 02	0.35634E 00			
0.48797E 01	0.73088E 01	0.16691E 02	0.39447E 02	0.42313E 00			
0.43615E 01	0.67043E 01	0.17296E 02	0.34953E 02	0.49482E 00			
0.39290E 01	0.61656E 01	0.17834E 02	0.30982E 02	0.57564E 00			
0.35691E 01	0.56785E 01	0.18322E 02	0.27339E 02	0.67015E 00			
0.32689E 01	0.52345E 01	0.18766E 02	0.23966E 02	0.78301E 00			
0.30175E 01	0.48289E 01	0.19171E 02	0.20860E 02	0.91903E 00			
0.28055E 01	0.44588E 01	0.19541E 02	0.18040E 02	0.10832E 01			
0.26250E 01	0.41219E 01	0.19878E 02	0.15521E 02	0.12807E 01			
0.24697E 01	0.38165E 01	0.20184E 02	0.13307E 02	0.15168E 01			
0.23342E 01	0.35404E 01	0.20460E 02	0.11388E 02	0.17966E 01			
0.22140E 01	0.32914E 01	0.20709E 02	0.97467E 01	0.21247E 01			
0.21056E 01	0.30675E 01	0.20933E 02	0.83562E 01	0.25050E 01			
0.20063E 01	0.28661E 01	0.21134E 02	0.71877E 01	0.29403E 01			
0.19141E 01	0.26851E 01	0.21315E 02	0.62116E 01	0.34314E 01			
0.18274E 01	0.25222E 01	0.21478E 02	0.53995E 01	0.39777E 01			
0.16667E 01	0.22421E 01	0.21758E 02	0.41665E 01	0.52221E 01			
0.15194E 01	0.20110E 01	0.21989E 02	0.33171E 01	0.66290E 01			
0.13835E 01	0.18167E 01	0.22183E 02	0.27268E 01	0.81352E 01			
0.12583E 01	0.16499E 01	0.22350E 02	0.23096E 01	0.96771E 01			
0.11435E 01	0.15039E 01	0.22496E 02	0.20074E 01	0.11207E 02			

CU K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(7) 4F

S(F(I,I))*2	S(F(I,J))*2	Z-F	(SF(I,I))*2	INC/SCN
0.25000E 02	0.25000E 02	-0.26870E-03	0.62501E 03	-0.42991E-03
0.24858E 02	0.24920E 02	0.79503E-01	0.62144E 03	0.12793E-03
0.24440E 02	0.24587E 02	0.31306E 00	0.61092E 03	0.51244E-03
0.23777E 02	0.24316E 02	0.68422E 00	0.59402E 03	0.11519E-02
0.22910E 02	0.23831E 02	0.11693E 01	0.57157E 03	0.20457E-02
0.21893E 02	0.23259E 02	0.17409E 01	0.54462E 03	0.31965E-02
0.20779E 02	0.22628E 02	0.23716E 01	0.51431E 03	0.48115E-02
0.19619E 02	0.21962E 02	0.30376E 01	0.48180E 03	0.63045E-02
0.18456E 02	0.21261E 02	0.37188E 01	0.44813E 03	0.82965E-01
0.17331E 02	0.20599E 02	0.44007E 01	0.41425E 03	0.10623E-01
0.16264E 02	0.19927E 02	0.50733E 01	0.38093E 03	0.13319E-01
0.15275E 02	0.19269E 02	0.57305E 01	0.34878E 03	0.16430E-01
0.14374E 02	0.18631E 02	0.63689E 01	0.31825E 03	0.20012E-01
0.13562E 02	0.18013E 02	0.69371E 01	0.28964E 03	0.24123E-01
0.12840E 02	0.17415E 02	0.75847E 01	0.26314E 03	0.28824E-01
0.12206E 02	0.16838E 02	0.81620E 01	0.23881E 03	0.34178E-01
0.11636E 02	0.16281E 02	0.87194E 01	0.21566E 03	0.40244E-01
0.11138E 02	0.15742E 02	0.92575E 01	0.19665E 03	0.47081E-01
0.10698E 02	0.15223E 02	0.97768E 01	0.17862E 03	0.54735E-01
0.10307E 02	0.14722E 02	0.10278E 02	0.16250E 03	0.63247E-01
0.99545E 01	0.14240E 02	0.10760E 02	0.14812E 03	0.72543E-01
0.93396E 01	0.13329E 02	0.11671E 02	0.12401E 03	0.94113E-01
0.88044E 01	0.12490E 02	0.12510E 02	0.10510E 03	0.11903E 00
0.83159E 01	0.11722E 02	0.13278E 02	0.90321E 02	0.14701E 00
0.78550E 01	0.11022E 02	0.13978E 02	0.78767E 02	0.17745E 00
0.74129E 01	0.10387E 02	0.14613E 02	0.59695E 02	0.20967E 00
0.69871E 01	0.98131E 01	0.15187E 02	0.52514E 02	0.24294E 00
0.65787E 01	0.92936E 01	0.15706E 02	0.56760E 02	0.27672E 00
0.61901E 01	0.88227E 01	0.16177E 02	0.52075E 02	0.31066E 00
0.58237E 01	0.83941E 01	0.16606E 02	0.48185E 02	0.34453E 00
0.54811E 01	0.80019E 01	0.16998E 02	0.44680E 02	0.37874E 00
0.48701E 01	0.73060E 01	0.17694E 02	0.39442E 02	0.44861E 00
0.43544E 01	0.67002E 01	0.18300E 02	0.34938E 02	0.52378E 00
0.39237E 01	0.61609E 01	0.18839E 02	0.30950E 02	0.60870E 00
0.35649E 01	0.56734E 01	0.19327E 02	0.27292E 02	0.70613E 00
0.32656E 01	0.52293E 01	0.19771E 02	0.23909E 02	0.82591E 00
0.30148E 01	0.48237E 01	0.20176E 02	0.20795E 02	0.97005E 00
0.28032E 01	0.44537E 01	0.20546E 02	0.17979E 02	0.11428E 01
0.26232E 01	0.41170E 01	0.20883E 02	0.15464E 02	0.13504E 01
0.24682E 01	0.38117E 01	0.21168E 02	0.13255E 02	0.15965E 01
0.23330E 01	0.35357E 01	0.21464E 02	0.11345E 02	0.18922E 01
0.22130E 01	0.32870E 01	0.21713E 02	0.97064E 01	0.22355E 01
0.21049E 01	0.30633E 01	0.21937E 02	0.83243E 01	0.26303E 01
0.20057E 01	0.28622E 01	0.22138E 02	0.71616E 01	0.30912E 01
0.19136E 01	0.26814E 01	0.22319E 02	0.61905E 01	0.36003E 01
0.18270E 01	0.25186E 01	0.22481E 02	0.53827E 01	0.41768E 01
0.16664E 01	0.22390E 01	0.22761E 02	0.41561E 01	0.54755E 01
0.15191E 01	0.20083E 01	0.22992E 02	0.33115E 01	0.69441E 01
0.13833E 01	0.18143E 01	0.23186E 02	0.27234E 01	0.85134E 01
0.12581E 01	0.16479E 01	0.23352E 02	0.23079E 01	0.10119E 02
0.11433E 01	0.15022E 01	0.23498E 02	0.20065E 01	0.11710E 02

NI K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(8) 3F

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2	INC/COH
0.26000E 02	02	0.26000E 02	02	0.78181E-03	0.67599E 03	0.41688E-06
0.25859E 02	02	0.25921E 02	02	0.78640E-01	0.67234E 03	0.11696E-03
0.25448E 02	02	0.25692E 02	02	0.30834E 00	0.66157E 03	0.46607E-03
0.24792E 02	02	0.25326E 02	02	0.67423E 00	0.64422E 03	0.10466E-02
0.23932E 02	02	0.24846E 02	02	0.11540E 01	0.62112E 03	0.18579E-02
0.22916E 02	02	0.24278E 02	02	0.17215E 01	0.59329E 03	0.29016E-02
0.21796E 02	02	0.23649E 02	02	0.23505E 01	0.56185E 03	0.41835E-02
0.20621E 02	02	0.22983E 02	02	0.30172E 01	0.52795E 03	0.57149E-02
0.19434E 02	02	0.22298E 02	02	0.37018E 01	0.49267E 03	0.75139E-02
0.18272E 02	02	0.21611E 02	02	0.43895E 01	0.45695E 03	0.96061E-02
0.17163E 02	02	0.20930E 02	02	0.50697E 01	0.42160E 03	0.12025E-01
0.16124E 02	02	0.20264E 02	02	0.57357E 01	0.38728E 03	0.14810E-01
0.15168E 02	02	0.19616E 02	02	0.63839E 01	0.35448E 03	0.18009E-01
0.14301E 02	02	0.18987E 02	02	0.70126E 01	0.32355E 03	0.21674E-01
0.13521E 02	02	0.18379E 02	02	0.76213E 01	0.29470E 03	0.25861E-01
0.12827E 02	02	0.17790E 02	02	0.82102E 01	0.26805E 03	0.30630E-01
0.12211E 02	02	0.17220E 02	02	0.87800E 01	0.24362E 03	0.36039E-01
0.11666E 02	02	0.16669E 02	02	0.93312E 01	0.22140E 03	0.42146E-01
0.11183E 02	02	0.16136E 02	02	0.98644E 01	0.20129E 03	0.49006E-01
0.10755E 02	02	0.15620E 02	02	0.10380E 02	0.18318E 03	0.56665E-01
0.10372E 02	02	0.15121E 02	02	0.10879E 02	0.16694E 03	0.65164E-01
0.97120E 01	01	0.14176E 02	02	0.11824E 02	0.13948E 03	0.84774E-01
0.91509E 01	01	0.13298E 02	02	0.12702E 02	0.11773E 03	0.10789E 00
0.86507E 01	01	0.12489E 02	02	0.13511E 02	0.10058E 03	0.13433E 00
0.81871E 01	01	0.11746E 02	02	0.14254E 02	0.87095E 02	0.16366E 00
0.77464E 01	01	0.11067E 02	02	0.14933E 02	0.76459E 02	0.19530E 00
0.73228E 01	01	0.10450E 02	02	0.15550E 02	0.68030E 02	0.22857E 00
0.69149E 01	01	0.98898E 01	01	0.16110E 02	0.61292E 02	0.26284E 00
0.65239E 01	01	0.93806E 01	01	0.16619E 02	0.55843E 02	0.29761E 00
0.61519E 01	01	0.89171E 01	01	0.17083E 02	0.51368E 02	0.33256E 00
0.58007E 01	01	0.84936E 01	01	0.17506E 02	0.47627E 02	0.36757E 00
0.51660E 01	01	0.77461E 01	01	0.18254E 02	0.41648E 02	0.43829E 00
0.46220E 01	01	0.71017E 01	01	0.18898E 02	0.35903E 02	0.51211E 00
0.41626E 01	01	0.65336E 01	01	0.19466E 02	0.32841E 02	0.59275E 00
0.37770E 01	01	0.60239E 01	01	0.19976E 02	0.29184E 02	0.68449E 00
0.34537E 01	01	0.55612E 01	01	0.20439E 02	0.25814E 02	0.79179E 00
0.31818E 01	01	0.51389E 01	01	0.20861E 02	0.22695E 02	0.91920E 00
0.29521E 01	01	0.47527E 01	01	0.21247E 02	0.19830E 02	0.10715E 01
0.27567E 01	01	0.43999E 01	01	0.21600E 02	0.17232E 02	0.12535E 01
0.25890E 01	01	0.40785E 01	01	0.21921E 02	0.14910E 02	0.14702E 01
0.24435E 01	01	0.37865E 01	01	0.22214E 02	0.12864E 02	0.17268E 01
0.23154E 01	01	0.35219E 01	01	0.22478E 02	0.11083E 02	0.20281E 01
0.22011E 01	01	0.32827E 01	01	0.22717E 02	0.95503E 01	0.23786E 01
0.20974E 01	01	0.30668E 01	01	0.22933E 02	0.82442E 01	0.27817E 01
0.20021E 01	01	0.28721E 01	01	0.23128E 02	0.71381E 01	0.32401E 01
0.19132E 01	01	0.26964E 01	01	0.23304E 02	0.62067E 01	0.37546E 01
0.17500E 01	01	0.23941E 01	01	0.23606E 02	0.47716E 01	0.49472E 01
0.16012E 01	01	0.21450E 01	01	0.23855E 02	0.37676E 01	0.63315E 01
0.14639E 01	01	0.19367E 01	01	0.24063E 02	0.30632E 01	0.78555E 01
0.13368E 01	01	0.17592E 01	01	0.24241E 02	0.25635E 01	0.94563E 01
0.12196E 01	01	0.16051E 01	01	0.24395E 02	0.22024E 01	0.11077E 02

CU K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(9) 2D

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2		INC/COH
0.27000E 02	0.27000E 02	-0.48876E-04	0.72900E 03	-0.57045E-07			
0.26862E 02	0.26923E 02	0.76597E-01	0.72528E 03	0.10561E-03			
0.26458E 02	0.26698E 02	0.30165E 00	0.71429E 03	0.42230E-03			
0.25811E 02	0.26339E 02	0.66124E 00	0.69655E 03	0.94931E-03			
0.24958E 02	0.25665E 02	0.11347E 01	0.67284E 03	0.16884E-02			
0.23946E 02	0.25303E 02	0.16974E 01	0.64416E 03	0.26351E-02			
0.22822E 02	0.24676E 02	0.23242E 01	0.61166E 03	0.37999E-02			
0.21635E 02	0.24008E 02	0.29917E 01	0.57643E 03	0.51900E-02			
0.20427E 02	0.23320E 02	0.36798E 01	0.53956E 03	0.68200E-02			
0.19234E 02	0.22627E 02	0.43733E 01	0.50205E 03	0.87109E-02			
0.18086E 02	0.21939E 02	0.50612E 01	0.46474E 03	0.10890E-01			
0.17002E 02	0.21264E 02	0.57361E 01	0.42830E 03	0.13393E-01			
0.15996E 02	0.20606E 02	0.63941E 01	0.39327E 03	0.16259E-01			
0.15075E 02	0.19967E 02	0.70330E 01	0.36004E 03	0.19534E-01			
0.14241E 02	0.19348E 02	0.76523E 01	0.32886E 03	0.23270E-01			
0.13492E 02	0.18748E 02	0.82523E 01	0.29967E 03	0.27519E-01			
0.12824E 02	0.18166E 02	0.88335E 01	0.27315E 03	0.32339E-01			
0.12230E 02	0.17603E 02	0.93967E 01	0.24866E 03	0.37767E-01			
0.11703E 02	0.17056E 02	0.99423E 01	0.22639E 03	0.43916E-01			
0.11234E 02	0.16529E 02	0.10471E 02	0.20620E 03	0.50760E-01			
0.10816E 02	0.16017E 02	0.10983E 02	0.18799E 03	0.58426E-01			
0.10102E 02	0.15041E 02	0.11959E 02	0.15692E 03	0.75207E-01			
0.95059E 01	0.14131E 02	0.12869E 02	0.13207E 03	0.97448E-01			
0.89869E 01	0.13284E 02	0.13716E 02	0.11230E 03	0.12213E 00			
0.85155E 01	0.12503E 02	0.14497E 02	0.96637E 02	0.15002E 00			
0.80736E 01	0.11784E 02	0.15216E 02	0.84226E 02	0.18066E 00			
0.76513E 01	0.11125E 02	0.15875E 02	0.74366E 02	0.21347E 00			
0.72446E 01	0.10524E 02	0.16476E 02	0.66486E 02	0.24761E 00			
0.68530E 01	0.99755E 01	0.17025E 02	0.60142E 02	0.28507E 00			
0.64776E 01	0.94751E 01	0.17525E 02	0.54970E 02	0.31831E 00			
0.61203E 01	0.90177E 01	0.17982E 02	0.50696E 02	0.35471E 00			
0.54661E 01	0.82123E 01	0.18788E 02	0.44023E 02	0.42677E 00			
0.48968E 01	0.75231E 01	0.19477E 02	0.38927E 02	0.50634E 00			
0.44103E 01	0.69211E 01	0.20079E 02	0.34717E 02	0.57355E 00			
0.39985E 01	0.63655E 01	0.20614E 02	0.31018E 02	0.65460E 00			
0.36510E 01	0.59021E 01	0.21096E 02	0.27644E 02	0.75321E 00			
0.33576E 01	0.54620E 01	0.21538E 02	0.24519E 02	0.87840E 00			
0.31089E 01	0.50594E 01	0.21941E 02	0.21826E 02	0.10145E 01			
0.28973E 01	0.46908E 01	0.22309E 02	0.18970E 02	0.11760E 01			
0.27157E 01	0.43537E 01	0.22646E 02	0.16560E 02	0.13575E 01			
0.25587E 01	0.40461E 01	0.22954E 02	0.14403E 02	0.15936E 01			
0.24214E 01	0.37660E 01	0.23234E 02	0.12497E 02	0.18591E 01			
0.22998E 01	0.35116E 01	0.23466E 02	0.10832E 02	0.21684E 01			
0.21905E 01	0.32809E 01	0.23719E 02	0.93915E 01	0.25255E 01			
0.20911E 01	0.30721E 01	0.23928E 02	0.81557E 01	0.29339E 01			
0.19992E 01	0.28831E 01	0.24117E 02	0.71025E 01	0.33956E 01			
0.18324E 01	0.25570E 01	0.24443E 02	0.54546E 01	0.44812E 01			
0.16817E 01	0.22682E 01	0.24712E 02	0.42822E 01	0.57758E 01			
0.15429E 01	0.20640E 01	0.24936E 02	0.34500E 01	0.72279E 01			
0.14142E 01	0.18740E 01	0.25126E 02	0.28556E 01	0.87933E 01			
0.12948E 01	0.17102E 01	0.25290E 02	0.24262E 01	0.10424E 02			

CU K(2)L(8)3S(2)3P(6)3D(10) 1S

S(F(1,1))*2		S(F(1,J))*2		Z-F	(SF(1,1))*2		INC/CON
0.28000E 02	02	0.28000E 02	02	-0.30780E-03	0.78401E 03	03	-0.39265E-06
0.27831E 02	02	0.27898E 02	02	0.10237E 00	0.77926E 03	03	0.13137E-03
0.27336E 02	02	0.27599E 02	02	0.40101E 00	0.76531E 03	03	0.52399E-03
0.26555E 02	02	0.27130E 02	02	0.86955E 00	0.74301E 03	03	0.11703E-02
0.25544E 02	02	0.26529E 02	02	0.14706E 01	0.71367E 03	03	0.20810E-02
0.24368E 02	02	0.25836E 02	02	0.21638E 01	0.67881E 03	03	0.31876E-02
0.23093E 02	02	0.25090E 02	02	0.29098E 01	0.64005E 03	03	0.45462E-02
0.21777E 02	02	0.24323E 02	02	0.36772E 01	0.59894E 03	03	0.61395E-02
0.20469E 02	02	0.23557E 02	02	0.44429E 01	0.55682E 03	03	0.79791E-02
0.19204E 02	02	0.22803E 02	02	0.51925E 01	0.51432E 03	03	0.10088E-01
0.18008E 02	02	0.22082E 02	02	0.59181E 01	0.47331E 03	03	0.12491E-01
0.16898E 02	02	0.21383E 02	02	0.66170E 01	0.43444E 03	03	0.15231E-01
0.15881E 02	02	0.20711E 02	02	0.72893E 01	0.39715E 03	03	0.18354E-01
0.14959E 02	02	0.20063E 02	02	0.79367E 01	0.36223E 03	03	0.21911E-01
0.14131E 02	02	0.19439E 02	02	0.85614E 01	0.32982E 03	03	0.25958E-01
0.13392E 02	02	0.18835E 02	02	0.91655E 01	0.29998E 03	03	0.30554E-01
0.12735E 02	02	0.18249E 02	02	0.97508E 01	0.27267E 03	03	0.35760E-01
0.12153E 02	02	0.17681E 02	02	0.10319E 02	0.24783E 03	03	0.41636E-01
0.11636E 02	02	0.17130E 02	02	0.10870E 02	0.22533E 03	03	0.48240E-01
0.11177E 02	02	0.16595E 02	02	0.11405E 02	0.20503E 03	03	0.55624E-01
0.10767E 02	02	0.16076E 02	02	0.11924E 02	0.18679E 03	03	0.63835E-01
0.10064E 02	02	0.15086E 02	02	0.12914E 02	0.15582E 03	03	0.82878E-01
0.94749E 01	01	0.14160E 02	02	0.13840E 02	0.13114E 03	03	0.10553E 00
0.89587E 01	01	0.13300E 02	02	0.14700E 02	0.11158E 03	03	0.13174E 00
0.84881E 01	01	0.12507E 02	02	0.15493E 02	0.96105E 02	02	0.16121E 00
0.80461E 01	01	0.11779E 02	02	0.16221E 02	0.83855E 02	02	0.19344E 00
0.76238E 01	01	0.11114E 02	02	0.16886E 02	0.74123E 02	02	0.22782E 00
0.72175E 01	01	0.10507E 02	02	0.17493E 02	0.66343E 02	02	0.26367E 00
0.68268E 01	01	0.99561E 01	01	0.18044E 02	0.60068E 02	02	0.30039E 00
0.64530E 01	01	0.94543E 01	01	0.18546E 02	0.54945E 02	02	0.33753E 00
0.60977E 01	01	0.89966E 01	01	0.19003E 02	0.50700E 02	02	0.37482E 00
0.54478E 01	01	0.81926E 01	01	0.19807E 02	0.44049E 02	02	0.44967E 00
0.48827E 01	01	0.75050E 01	01	0.20494E 02	0.38944E 02	02	0.52624E 00
0.43995E 01	01	0.69068E 01	01	0.21093E 02	0.34715E 02	02	0.60760E 00
0.39901E 01	01	0.63736E 01	01	0.21626E 02	0.30997E 02	02	0.69768E 00
0.36444E 01	01	0.58921E 01	01	0.22108E 02	0.27610E 02	02	0.80071E 00
0.33523E 01	01	0.54535E 01	01	0.22547E 02	0.24430E 02	02	0.92103E 00
0.31048E 01	01	0.50521E 01	01	0.22948E 02	0.21585E 02	02	0.10631E 01
0.28940E 01	01	0.46845E 01	01	0.23316E 02	0.18931E 02	02	0.12316E 01
0.27132E 01	01	0.43481E 01	01	0.23652E 02	0.16526E 02	02	0.14312E 01
0.25568E 01	01	0.40411E 01	01	0.23959E 02	0.14374E 02	02	0.16668E 01
0.24199E 01	01	0.37615E 01	01	0.24238E 02	0.12473E 02	02	0.19433E 01
0.22986E 01	01	0.35076E 01	01	0.24492E 02	0.10812E 02	02	0.22654E 01
0.21897E 01	01	0.32773E 01	01	0.24723E 02	0.93749E 01	01	0.26371E 01
0.20904E 01	01	0.30688E 01	01	0.24931E 02	0.81421E 01	01	0.30620E 01
0.19987E 01	01	0.28802E 01	01	0.25120E 02	0.70913E 01	01	0.35424E 01
0.18321E 01	01	0.25546E 01	01	0.25445E 02	0.54469E 01	01	0.46716E 01
0.16815E 01	01	0.22861E 01	01	0.25714E 02	0.42769E 01	01	0.60123E 01
0.15428E 01	01	0.20621E 01	01	0.25938E 02	0.34464E 01	01	0.75260E 01
0.14141E 01	01	0.18724E 01	01	0.26128E 02	0.26535E 01	01	0.91564E 01
0.12948E 01	01	0.17088E 01	01	0.26291E 02	0.24248E 01	01	0.10843E 02

S(F(1,1))*2	S(F(1,J))*2	Z-F	(SF(1,1))*2	INC/COH
0.28000E 02	0.28000E 02	-0.23365E-03	0.78401E 03	-0.29852E-06
0.27865E 02	0.27925E 02	0.74545E-01	0.78023E 03	0.95543E-04
0.27468E 02	0.27706E 02	0.29442E 00	0.76905E 03	0.36283E-03
0.26832E 02	0.27353E 02	0.64565E 00	0.75398E 03	0.86107E-03
0.25990E 02	0.26888E 02	0.11121E 01	0.72677E 03	0.15302E-02
0.24985E 02	0.26332E 02	0.16878E 01	0.69739E 03	0.23915E-02
0.23863E 02	0.25710E 02	0.22897E 01	0.66392E 03	0.34488E-02
0.22668E 02	0.25045E 02	0.29552E 01	0.62799E 03	0.47095E-02
0.21444E 02	0.24355E 02	0.36446E 01	0.58917E 03	0.61659E-02
0.20226E 02	0.23656E 02	0.43422E 01	0.54997E 03	0.78938E-02
0.19043E 02	0.22964E 02	0.50364E 01	0.51074E 03	0.95510E-02
0.17918E 02	0.22280E 02	0.57195E 01	0.47221E 03	0.12112E-01
0.16864E 02	0.21613E 02	0.63858E 01	0.43495E 03	0.14664E-01
0.15891E 02	0.20964E 02	0.70358E 01	0.39938E 03	0.17617E-01
0.15003E 02	0.20334E 02	0.76658E 01	0.36581E 03	0.20956E-01
0.14199E 02	0.19723E 02	0.82757E 01	0.33442E 03	0.24750E-01
0.13478E 02	0.19131E 02	0.88692E 01	0.30530E 03	0.29050E-01
0.12833E 02	0.18556E 02	0.94440E 01	0.27849E 03	0.33912E-01
0.12259E 02	0.17998E 02	0.10002E 02	0.25393E 03	0.37388E-01
0.11747E 02	0.17457E 02	0.10543E 02	0.23156E 03	0.40531E-01
0.11290E 02	0.16931E 02	0.11059E 02	0.21127E 03	0.52391E-01
0.10514E 02	0.15927E 02	0.12073E 02	0.17541E 03	0.56438E-01
0.93745E 01	0.14984E 02	0.13016E 02	0.14825E 03	0.87795E-01
0.93283E 01	0.14104E 02	0.13896E 02	0.12566E 03	0.11058E 03
0.88422E 01	0.13285E 02	0.14715E 02	0.10763E 03	0.13672E 00
0.83941E 01	0.12527E 02	0.15473E 02	0.93253E 02	0.15593E 00
0.79706E 01	0.11829E 02	0.16171E 02	0.81779E 02	0.19779E 00
0.75647E 01	0.11188E 02	0.16812E 02	0.72589E 02	0.23161E 00
0.71736E 01	0.10601E 02	0.17399E 02	0.65185E 02	0.25392E 00
0.67973E 01	0.10064E 02	0.17936E 02	0.59169E 02	0.30314E 00
0.64363E 01	0.95720E 01	0.18428E 02	0.54226E 02	0.33963E 00
0.57689E 01	0.87052E 01	0.19294E 02	0.46635E 02	0.41372E 00
0.51786E 01	0.79683E 01	0.20052E 02	0.41019E 02	0.48835E 00
0.46671E 01	0.73281E 01	0.20672E 02	0.36547E 02	0.56562E 00
0.42296E 01	0.67626E 01	0.21237E 02	0.32742E 02	0.64863E 00
0.38577E 01	0.62553E 01	0.21745E 02	0.29342E 02	0.74139E 00
0.35421E 01	0.57952E 01	0.22265E 02	0.26220E 02	0.84568E 00
0.32738E 01	0.53749E 01	0.22825E 02	0.23324E 02	0.97052E 00
0.30449E 01	0.49899E 01	0.23010E 02	0.20544E 02	0.11146E 01
0.28487E 01	0.46370E 01	0.23363E 02	0.18163E 02	0.12848E 01
0.26791E 01	0.43138E 01	0.23666E 02	0.15949E 02	0.14851E 01
0.25314E 01	0.40164E 01	0.23982E 02	0.13944E 02	0.17194E 01
0.24014E 01	0.37489E 01	0.24251E 02	0.12165E 02	0.19933E 01
0.22855E 01	0.35035E 01	0.24496E 02	0.10556E 02	0.23097E 01
0.21808E 01	0.32805E 01	0.24719E 02	0.92484E 01	0.26728E 01
0.20851E 01	0.30780E 01	0.24922E 02	0.80767E 01	0.30857E 01
0.19134E 01	0.27274E 01	0.25273E 02	0.682133E 01	0.40675E 01
0.17602E 01	0.24376E 01	0.25562E 02	0.48631E 01	0.52564E 01
0.16199E 01	0.21963E 01	0.25854E 02	0.38916E 01	0.65355E 01
0.14898E 01	0.19926E 01	0.26067E 02	0.31920E 01	0.81476E 01
0.13689E 01	0.18161E 01	0.26162E 02	0.26841E 01	0.97543E 01

S(F(1,1))*2	S(F(1,J))*2	Z-F	(SF(1,1))*2	INC/COH
0.29000E 02	0.29000E 02	-0.35596E-03	0.84101E 03	-0.42325E-06
0.28705E 02	0.28772E 02	0.22795E 00	0.83233E 03	0.27387E-03
0.27921E 02	0.28187E 02	0.81292E 00	0.80832E 03	0.10057E-02
0.26851E 02	0.27437E 02	0.15627E 01	0.77361E 03	0.20200E-02
0.25642E 02	0.26650E 02	0.23498E 01	0.73276E 03	0.32067E-02
0.24360E 02	0.25866E 02	0.31343E 01	0.68889E 03	0.45498E-02
0.23038E 02	0.25086E 02	0.39137E 01	0.64382E 03	0.60788E-02
0.21708E 02	0.24312E 02	0.46880E 01	0.59873E 03	0.78299E-02
0.20399E 02	0.23547E 02	0.54527E 01	0.55440E 03	0.98353E-02
0.19141E 02	0.22798E 02	0.62016E 01	0.51145E 03	0.12126E-01
0.17954E 02	0.22071E 02	0.69291E 01	0.47029E 03	0.14734E-01
0.16851E 02	0.21368E 02	0.76318E 01	0.43124E 03	0.17697E-01
0.15842E 02	0.20692E 02	0.83083E 01	0.39447E 03	0.21062E-01
0.14926E 02	0.20041E 02	0.89594E 01	0.36013E 03	0.24878E-01
0.14104E 02	0.19413E 02	0.95866E 01	0.32826E 03	0.29204E-01
0.13369E 02	0.18808E 02	0.10192E 02	0.29887E 03	0.34101E-01
0.12716E 02	0.18223E 02	0.10777E 02	0.27193E 03	0.39631E-01
0.12136E 02	0.17657E 02	0.11343E 02	0.24737E 03	0.45857E-01
0.11621E 02	0.17108E 02	0.11892E 02	0.22507E 03	0.52839E-01
0.11164E 02	0.16575E 02	0.12425E 02	0.20492E 03	0.60634E-01
0.10755E 02	0.16059E 02	0.12941E 02	0.18677E 03	0.69290E-01
0.10054E 02	0.15073E 02	0.13927E 02	0.15590E 03	0.89333E-01
0.94657E 01	0.14152E 02	0.14848E 02	0.13124E 03	0.11313E 00
0.89505E 01	0.13295E 02	0.15705E 02	0.11168E 03	0.14063E 00
0.84808E 01	0.12503E 02	0.16497E 02	0.96186E 02	0.17151E 00
0.80398E 01	0.11776E 02	0.17224E 02	0.83918E 02	0.20526E 00
0.76182E 01	0.11110E 02	0.17890E 02	0.74170E 02	0.24120E 00
0.72126E 01	0.10504E 02	0.18496E 02	0.66377E 02	0.27865E 00
0.68225E 01	0.99524E 01	0.19048E 02	0.60092E 02	0.31697E 00
0.64492E 01	0.94504E 01	0.19550E 02	0.54962E 02	0.35570E 00
0.60942E 01	0.89925E 01	0.20007E 02	0.50712E 02	0.39453E 00
0.54449E 01	0.81887E 01	0.20811E 02	0.44056E 02	0.47238E 00
0.48803E 01	0.75026E 01	0.21497E 02	0.38951E 02	0.55191E 00
0.43975E 01	0.69042E 01	0.22096E 02	0.34724E 02	0.63633E 00
0.39884E 01	0.63718E 01	0.22628E 02	0.31008E 02	0.72976E 00
0.36431E 01	0.58912E 01	0.23109E 02	0.27623E 02	0.83659E 00
0.33513E 01	0.54532E 01	0.23547E 02	0.24493E 02	0.96137E 00
0.31041E 01	0.50524E 01	0.23948E 02	0.21599E 02	0.11087E 01
0.28935E 01	0.46852E 01	0.24315E 02	0.18944E 02	0.12835E 01
0.27128E 01	0.43491E 01	0.24651E 02	0.16538E 02	0.14905E 01
0.25565E 01	0.40422E 01	0.24958E 02	0.14385E 02	0.17350E 01
0.24197E 01	0.37627E 01	0.25237E 02	0.12482E 02	0.20218E 01
0.22985E 01	0.35088E 01	0.25491E 02	0.10820E 02	0.23559E 01
0.21896E 01	0.32785E 01	0.25722E 02	0.93819E 01	0.27416E 01
0.20903E 01	0.30699E 01	0.25930E 02	0.81479E 01	0.31824E 01
0.19987E 01	0.28811E 01	0.26119E 02	0.70961E 01	0.36808E 01
0.18321E 01	0.25553E 01	0.26445E 02	0.54500E 01	0.48522E 01
0.16815E 01	0.22867E 01	0.26713E 02	0.42789E 01	0.62430E 01
0.15428E 01	0.20626E 01	0.26937E 02	0.34476E 01	0.78133E 01
0.14141E 01	0.18728E 01	0.27127E 02	0.28542E 01	0.95044E 01
0.12948E 01	0.17092E 01	0.27291E 02	0.24252E 01	0.11253E 02

ZN K(2)L(8)3S(2)3P(6)4S(1)3D(10) 2S

S(F(I,I))*2 S(F(I,J))*2 Z-F (SF(I,I))*2 INC/COH

0.29000E 02	0.29000E 02	-0.72956E-04	0.84100E 03	-0.86749E-07
0.28795E 02	0.28856E 02	0.14405E 00	0.83302E 03	0.17251E-03
0.28214E 02	0.28455E 02	0.54514E 00	0.81772E 03	0.66685E-03
0.27342E 02	0.27874E 02	0.11265E 01	0.79084E 03	0.14244E-02
0.26275E 02	0.27197E 02	0.18033E 01	0.75671E 03	0.23830E-02
0.25135E 02	0.26487E 02	0.25135E 01	0.71776E 03	0.35019E-02
0.23877E 02	0.25774E 02	0.32263E 01	0.67607E 03	0.47722E-02
0.22629E 02	0.25066E 02	0.39335E 01	0.63326E 03	0.62114E-02
0.21364E 02	0.24364E 02	0.46360E 01	0.59046E 03	0.78514E-02
0.20162E 02	0.23665E 02	0.53347E 01	0.54843E 03	0.97272E-02
0.18983E 02	0.22972E 02	0.60280E 01	0.50788E 03	0.11874E-01
0.17853E 02	0.22288E 02	0.67124E 01	0.46855E 03	0.14326E-01
0.16816E 02	0.21616E 02	0.73836E 01	0.43130E 03	0.17119E-01
0.15849E 02	0.20962E 02	0.80380E 01	0.39606E 03	0.20294E-01
0.14966E 02	0.20326E 02	0.86736E 01	0.36302E 03	0.23893E-01
0.14167E 02	0.19711E 02	0.92893E 01	0.33219E 03	0.27964E-01
0.13450E 02	0.19115E 02	0.98850E 01	0.30360E 03	0.32550E-01
0.12809E 02	0.18539E 02	0.10401E 02	0.27724E 03	0.37734E-01
0.12237E 02	0.17981E 02	0.11019E 02	0.25307E 03	0.43542E-01
0.11728E 02	0.17441E 02	0.11559E 02	0.23100E 03	0.50040E-01
0.11274E 02	0.16918E 02	0.12082E 02	0.21094E 03	0.57279E-01
0.10500E 02	0.15919E 02	0.13081E 02	0.17637E 03	0.74166E-01
0.98631E 01	0.14982E 02	0.14018E 02	0.14834E 03	0.94496E-01
0.93132E 01	0.14106E 02	0.14894E 02	0.12580E 03	0.11839E 00
0.89331E 01	0.13289E 02	0.15711E 02	0.10777E 03	0.14578E 00
0.83859E 01	0.12531E 02	0.16409E 02	0.93381E 02	0.17535E 00
0.79630E 01	0.11832E 02	0.17168E 02	0.81883E 02	0.20968E 00
0.75576E 01	0.11190E 02	0.17810E 02	0.72669E 02	0.24509E 00
0.71671E 01	0.10601E 02	0.18399E 02	0.65243E 02	0.28207E 00
0.67912E 01	0.10062E 02	0.18938E 02	0.59209E 02	0.31985E 00
0.64311E 01	0.95693E 01	0.19431E 02	0.54255E 02	0.35815E 00
0.57641E 01	0.87020E 01	0.20298E 02	0.48642E 02	0.43519E 00
0.51746E 01	0.79635E 01	0.21036E 02	0.41018E 02	0.51266E 00
0.46640E 01	0.73243E 01	0.21676E 02	0.36546E 02	0.59311E 00
0.42271E 01	0.67508E 01	0.22240E 02	0.32744E 02	0.67921E 00
0.38558E 01	0.62536E 01	0.22746E 02	0.29349E 02	0.77303E 00
0.35406E 01	0.57945E 01	0.23205E 02	0.26232E 02	0.88464E 00
0.32727E 01	0.53752E 01	0.23825E 02	0.23540E 02	0.10122E 01
0.30441E 01	0.49908E 01	0.24009E 02	0.20662E 02	0.11620E 01
0.28481E 01	0.46364E 01	0.24362E 02	0.18202E 02	0.13384E 01
0.26787E 01	0.43155E 01	0.24665E 02	0.15967E 02	0.15480E 01
0.25311E 01	0.40202E 01	0.24980E 02	0.13961E 02	0.17593E 01
0.24011E 01	0.37507E 01	0.25249E 02	0.12181E 02	0.20728E 01
0.22853E 01	0.35053E 01	0.25495E 02	0.10519E 02	0.24010E 01
0.21807E 01	0.32822E 01	0.25718E 02	0.92592E 01	0.27775E 01
0.20850E 01	0.30796E 01	0.25920E 02	0.80657E 01	0.32057E 01
0.19133E 01	0.27266E 01	0.26271E 02	0.62190E 01	0.42243E 01
0.17601E 01	0.24586E 01	0.26561E 02	0.48684E 01	0.54531E 01
0.16192E 01	0.21989E 01	0.26803E 02	0.38934E 01	0.68843E 01
0.14898E 01	0.19531E 01	0.27007E 02	0.31927E 01	0.84590E 01
0.13668E 01	0.18184E 01	0.27162E 02	0.26843E 01	0.10126E 02

Appendix 3

F- 1S(2)2S(2)2P(6) 1S

S(F(I,I))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,I))*2	INC/CDH
0.99999E 01	0.99999E 01	0.64611E-04	0.99999E 02	0.64612E-06		
0.98552E 01	0.98973E 01	0.10273E 00	0.98548E 02	0.10424E-02		
0.94453E 01	0.96069E 01	0.39309E 00	0.94403E 02	0.41640E-02		
0.88345E 01	0.91740E 01	0.82604E 00	0.88115E 02	0.93745E-02		
0.81038E 01	0.86535E 01	0.13465E 01	0.80416E 02	0.16744E-01		
0.73297E 01	0.80942E 01	0.19058E 01	0.72031E 02	0.26459E-01		
0.65708E 01	0.75304E 01	0.24696E 01	0.63562E 02	0.38853E-01		
0.58649E 01	0.69827E 01	0.30173E 01	0.55441E 02	0.54423E-01		
0.52318E 01	0.64614E 01	0.35386E 01	0.47937E 02	0.73817E-01		
0.46785E 01	0.59712E 01	0.40283E 01	0.41191E 02	0.97809E-01		
0.42039E 01	0.55140E 01	0.44860E 01	0.35247E 02	0.12727E 00		
0.38019E 01	0.50905E 01	0.49095E 01	0.30091E 02	0.16315E 00		
0.34644E 01	0.47008E 01	0.52992E 01	0.25672E 02	0.20642E 00		
0.31824E 01	0.43444E 01	0.56556E 01	0.21918E 02	0.25804E 00		
0.29472E 01	0.40206E 01	0.59794E 01	0.18750E 02	0.31890E 00		
0.27507E 01	0.37280E 01	0.62720E 01	0.16090E 02	0.38981E 00		
0.25858E 01	0.34651E 01	0.65349E 01	0.13863E 02	0.47138E 00		
0.24464E 01	0.32298E 01	0.67702E 01	0.12004E 02	0.56402E 00		
0.23274E 01	0.30202E 01	0.69798E 01	0.10451E 02	0.66785E 00		
0.22248E 01	0.28338E 01	0.71662E 01	0.91557E 01	0.78271E 00		
0.21350E 01	0.26683E 01	0.73317E 01	0.80735E 01	0.90812E 00		
0.19839E 01	0.23912E 01	0.76088E 01	0.64091E 01	0.11872E 01		
0.18585E 01	0.21718E 01	0.78282E 01	0.52336E 01	0.14957E 01		
0.17494E 01	0.19959E 01	0.80041E 01	0.43928E 01	0.18221E 01		
0.16511E 01	0.18518E 01	0.81482E 01	0.37818E 01	0.21546E 01		
0.15602E 01	0.17307E 01	0.82693E 01	0.33297E 01	0.24835E 01		
0.14749E 01	0.16260E 01	0.83740E 01	0.29878E 01	0.28027E 01		
0.13941E 01	0.15332E 01	0.84668E 01	0.27229E 01	0.31095E 01		
0.13173E 01	0.14487E 01	0.85513E 01	0.25118E 01	0.34044E 01		
0.12439E 01	0.13704E 01	0.86296E 01	0.23387E 01	0.36899E 01		
0.11738E 01	0.12968E 01	0.87032E 01	0.21922E 01	0.39700E 01		
0.10426E 01	0.11597E 01	0.88403E 01	0.19504E 01	0.45325E 01		
0.92271E 00	0.10334E 01	0.89666E 01	0.17433E 01	0.51287E 01		
0.81345E 00	0.91645E 00	0.90836E 01	0.15681E 01	0.57926E 01		
0.71437E 00	0.80862E 00	0.91914E 01	0.14024E 01	0.65541E 01		
0.62505E 00	0.71002E 00	0.92900E 01	0.12484E 01	0.74417E 01		
0.54503E 00	0.62068E 00	0.93793E 01	0.11056E 01	0.84836E 01		
0.47379E 00	0.54045E 00	0.94595E 01	0.97421E 00	0.97099E 01		
0.41075E 00	0.46900E 00	0.95310E 01	0.85449E 00	0.11154E 02		
0.35526E 00	0.40584E 00	0.95942E 01	0.74643E 00	0.12853E 02		
0.30668E 00	0.35037E 00	0.96496E 01	0.64978E 00	0.14851E 02		
0.26433E 00	0.30191E 00	0.96981E 01	0.56400E 00	0.17195E 02		
0.22755E 00	0.25978E 00	0.97402E 01	0.48840E 00	0.19543E 02		
0.19571E 00	0.22329E 00	0.97767E 01	0.42215E 00	0.23159E 02		
0.16823E 00	0.19179E 00	0.98082E 01	0.36438E 00	0.26917E 02		
0.14457E 00	0.16466E 00	0.98353E 01	0.31421E 00	0.31302E 02		
0.10675E 00	0.12136E 00	0.98786E 01	0.23326E 00	0.42350E 02		
0.78931E-01	0.89557E-01	0.99104E 01	0.17312E 00	0.57240E 02		
0.58514E-01	0.66262E-01	0.99337E 01	0.12868E 00	0.77198E 02		
0.43534E-01	0.49207E-01	0.99508E 01	0.95914E-01	0.10375E 03		
0.32530E-01	0.36704E-01	0.99633E 01	0.71763E-01	0.13884E 03		

CL- K(2)L(8)3S(2)3D(6) 1S

S(F(I,1))*2		S(F(I,J))*2		Z-F	(SF(I,1))*2		INC/COH
0.18000E 02	0.18000E 02	-0.62466E-04	0.32400E 03	-0.19279E-06			
0.17657E 02	0.17767E 02	0.23267E 00	0.31777E 03	0.73221E-03			
0.16729E 02	0.17137E 02	0.86264E 00	0.30036E 03	0.28720E-02			
0.15464E 02	0.16270E 02	0.17299E 01	0.27509E 03	0.62885E-02			
0.14125E 02	0.15327E 02	0.26733E 01	0.24595E 03	0.10869E-01			
0.12897E 02	0.14410E 02	0.35898E 01	0.21640E 03	0.16589E-01			
0.11860E 02	0.13561E 02	0.44386E 01	0.18879E 03	0.23511E-01			
0.11021E 02	0.12786E 02	0.52137E 01	0.16435E 03	0.31724E-01			
0.10346E 02	0.12080E 02	0.59204E 01	0.14347E 03	0.41265E-01			
0.97918E 01	0.11437E 02	0.65632E 01	0.12605E 03	0.52067E-01			
0.93193E 01	0.10855E 02	0.71447E 01	0.11172E 03	0.63950E-01			
0.88991E 01	0.10333E 02	0.76668E 01	0.10002E 03	0.76651E-01			
0.85110E 01	0.98675E 01	0.81325E 01	0.90488E 02	0.89874E-01			
0.81431E 01	0.94534E 01	0.85466E 01	0.82697E 02	0.10335E 00			
0.77890E 01	0.90848E 01	0.89152E 01	0.76282E 02	0.11687E 00			
0.74460E 01	0.87550E 01	0.92450E 01	0.70939E 02	0.13032E 00			
0.71133E 01	0.84568E 01	0.95432E 01	0.66418E 02	0.14368E 00			
0.67914E 01	0.81838E 01	0.98162E 01	0.62523E 02	0.15700E 00			
0.64810E 01	0.79302E 01	0.10070E 02	0.59098E 02	0.17039E 00			
0.61828E 01	0.76914E 01	0.10309E 02	0.56022E 02	0.18401E 00			
0.58975E 01	0.74636E 01	0.10536E 02	0.53204E 02	0.19804E 00			
0.53674E 01	0.70311E 01	0.10969E 02	0.48091E 02	0.22809E 00			
0.48917E 01	0.66194E 01	0.11381E 02	0.43418E 02	0.26212E 00			
0.44694E 01	0.62235E 01	0.11776E 02	0.39034E 02	0.30170E 00			
0.40978E 01	0.58430E 01	0.12157E 02	0.34894E 02	0.34840E 00			
0.37732E 01	0.54789E 01	0.12521E 02	0.31005E 02	0.40385E 00			
0.34914E 01	0.51327E 01	0.12867E 02	0.27392E 02	0.46975E 00			
0.32477E 01	0.48060E 01	0.13194E 02	0.24080E 02	0.54791E 00			
0.30374E 01	0.44996E 01	0.13500E 02	0.21086E 02	0.64025E 00			
0.28557E 01	0.42140E 01	0.13786E 02	0.18413E 02	0.74873E 00			
0.26981E 01	0.39490E 01	0.14051E 02	0.16052E 02	0.87536E 00			
0.24393E 01	0.34793E 01	0.14521E 02	0.12195E 02	0.11907E 01			
0.22339E 01	0.30842E 01	0.14916E 02	0.93270E 01	0.15992E 01			
0.20628E 01	0.27544E 01	0.15246E 02	0.72319E 01	0.21081E 01			
0.19136E 01	0.24798E 01	0.15520E 02	0.57155E 01	0.27154E 01			
0.17789E 01	0.22505E 01	0.15749E 02	0.46198E 01	0.34091E 01			
0.16550E 01	0.20575E 01	0.15942E 02	0.38247E 01	0.41683E 01			
0.15398E 01	0.18930E 01	0.16107E 02	0.32423E 01	0.49677E 01			
0.14322E 01	0.17507E 01	0.16249E 02	0.28101E 01	0.57825E 01			
0.13318E 01	0.16255E 01	0.16375E 02	0.24837E 01	0.65927E 01			
0.12381E 01	0.15136E 01	0.16486E 02	0.22322E 01	0.73857E 01			
0.11508E 01	0.14121E 01	0.16588E 02	0.20337E 01	0.81567E 01			
0.10696E 01	0.13189E 01	0.16681E 02	0.18727E 01	0.89073E 01			
0.99408E 00	0.12326E 01	0.16767E 02	0.17386E 01	0.96440E 01			
0.92378E 00	0.11519E 01	0.16848E 02	0.16237E 01	0.10376E 02			
0.85835E 00	0.10761E 01	0.16924E 02	0.15227E 01	0.11115E 02			
0.74068E 00	0.93737E 00	0.17063E 02	0.13482E 01	0.12655E 02			
0.63847E 00	0.81376E 00	0.17186E 02	0.11972E 01	0.14355E 02			
0.54960E 00	0.70382E 00	0.17296E 02	0.10615E 01	0.16294E 02			
0.47236E 00	0.60653E 00	0.17393E 02	0.93763E 00	0.18551E 02			
0.40532E 00	0.52098E 00	0.17479E 02	0.82441E 00	0.21202E 02			

S(F(1,1))*2	S(F(1,J))*2	Z-F	(SF(1,1))*2	INC/COH
0.36000E 02	0.36000E 02	0.72479E-04	0.12483E 04	0.55925E-01
0.35523E 02	0.35593E 02	0.30745E 00	0.12765E 04	0.24045E-03
0.34248E 02	0.34372E 02	0.11280E 01	0.12366E 04	0.91702E-03
0.32532E 02	0.33767E 02	0.22330E 01	0.11590E 04	0.12257E-02
0.30730E 02	0.32588E 02	0.34119E 01	0.10763E 04	0.31708E-02
0.29057E 02	0.31448E 02	0.45518E 01	0.99027E 03	0.45965E-02
0.27579E 02	0.30376E 02	0.56242E 01	0.90791E 03	0.61946E-02
0.26274E 02	0.29364E 02	0.66362E 01	0.83229E 03	0.75734E-02
0.25090E 02	0.28403E 02	0.75968E 01	0.76463E 03	0.97352E-02
0.23978E 02	0.27493E 02	0.85074E 01	0.70488E 03	0.12069E-01
0.22907E 02	0.26636E 02	0.93644E 01	0.65229E 03	0.14355E-01
0.21864E 02	0.25835E 02	0.10165E 02	0.60366E 03	0.15773E-01
0.20845E 02	0.25090E 02	0.10910E 02	0.56453E 03	0.17325E-01
0.19854E 02	0.24397E 02	0.11603E 02	0.52740E 03	0.22000E-01
0.18898E 02	0.23749E 02	0.12251E 02	0.49361E 03	0.24819E-01
0.17953E 02	0.23140E 02	0.12860E 02	0.46251E 03	0.27355E-01
0.17116E 02	0.22551E 02	0.13439E 02	0.43366E 03	0.30995E-01
0.16301E 02	0.22006E 02	0.13994E 02	0.40550E 03	0.34425E-01
0.15539E 02	0.21471E 02	0.14529E 02	0.38093E 03	0.38140E-01
0.14833E 02	0.20953E 02	0.15047E 02	0.35670E 03	0.42153E-01
0.14180E 02	0.20448E 02	0.15552E 02	0.33371E 03	0.46602E-01
0.13031E 02	0.19475E 02	0.15525E 02	0.29116E 03	0.55756E-01
0.12069E 02	0.18546E 02	0.17454E 02	0.25301E 03	0.60987E-01
0.11266E 02	0.17659E 02	0.16341E 02	0.21917E 03	0.83532E-01
0.10593E 02	0.16815E 02	0.19185E 02	0.18955E 03	0.10121E 00
0.10021E 02	0.16012E 02	0.19988E 02	0.16395E 03	0.12192E 00
0.95238E 01	0.15251E 02	0.20749E 02	0.14207E 03	0.14605E 00
0.90818E 01	0.14529E 02	0.21471E 02	0.12354E 03	0.17379E 00
0.86784E 01	0.13847E 02	0.22153E 02	0.10799E 03	0.20515E 00
0.83017E 01	0.13203E 02	0.22797E 02	0.94987E 02	0.24009E 00
0.79439E 01	0.12596E 02	0.23404E 02	0.84165E 02	0.27858E 00
0.72679E 01	0.11489E 02	0.24511E 02	0.67590E 02	0.35212E 00
0.66354E 01	0.10515E 02	0.25465E 02	0.56247E 02	0.45359E 00
0.60487E 01	0.96607E 01	0.26339E 02	0.46153E 02	0.54597E 00
0.55138E 01	0.89105E 01	0.27069E 02	0.42245E 02	0.64125E 00
0.50346E 01	0.82430E 01	0.27752E 02	0.37734E 02	0.73546E 00
0.46112E 01	0.76582E 01	0.28342E 02	0.34133E 02	0.83094E 00
0.42406E 01	0.71283E 01	0.28872E 02	0.31037E 02	0.93023E 00
0.39177E 01	0.66482E 01	0.29352E 02	0.26316E 02	0.10365E 01
0.36369E 01	0.62098E 01	0.29790E 02	0.25333E 02	0.11532E 01
0.33925E 01	0.58073E 01	0.30193E 02	0.23519E 02	0.12838E 01
0.31792E 01	0.54364E 01	0.30564E 02	0.21347E 02	0.14317E 01
0.29924E 01	0.50938E 01	0.30908E 02	0.19363E 02	0.16007E 01
0.28231E 01	0.47771E 01	0.31223E 02	0.17403E 02	0.17941E 01
0.26827E 01	0.44845E 01	0.31516E 02	0.15635E 02	0.20157E 01
0.25533E 01	0.42142E 01	0.31766E 02	0.14069E 02	0.22590E 01
0.23323E 01	0.37349E 01	0.32265E 02	0.11182E 02	0.26653E 01
0.21466E 01	0.33284E 01	0.32672E 02	0.09017E 01	0.30703E 01
0.19903E 01	0.29845E 01	0.33015E 02	0.71071E 01	0.43454E 01
0.18494E 01	0.26935E 01	0.33307E 02	0.57255E 01	0.58222E 01
0.17207E 01	0.24462E 01	0.33554E 02	0.46516E 01	0.71977E 01

B29862